

Переходы из парамагнитного состояния в соизмеримые магнитные структуры в оксидах RMn_2O_5

В.В. Меньшенин

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, 620990, ул. С. Ковалевской, 18 г. Екатеринбург, Россия

e-mail: menshenin@imp.uran.ru

Материалы, в которых в некоторых температурных интервалах сосуществуют несколько параметров дальнего порядка различной физической природы, интенсивно исследуются в последние годы. К таким материалам относятся, например, мультиферроики, где одновременно могут существовать дальний магнитный и сегнетоэлектрический порядок. Поскольку в мультиферроиках удается управлять магнитным состоянием с помощью электрического поля, а электрической поляризацией – с помощью магнитного поля, то эти соединения представляют интерес для прикладных разработок. Особые усилия направлены на поиск материалов, в которых связь между магнитной и сегнетоэлектрической подсистемой является сильной. Модельным классом таких систем являются оксиды RMn_2O_5 (R – редкоземельный ион, Bi, Y) в которых электрическая поляризация возникает только после появления дальнего магнитного порядка.

Экспериментально обнаружено, что сегнетоэлектрический дальний порядок появляется в системе только тогда, когда редкоземельный элемент оказывается тяжелее неодима. Более того, сегнетоэлектрический порядок появляется в несоизмеримой по одному направлению магнитной структуре и достигает максимального значения в соизмеримой антиферромагнитной фазе.

С другой стороны, если переход из парамагнитного состояния происходит в соизмеримую магнитную структуру, то ситуация не так однозначна. Так, в соединении PrMn_2O_5 переход происходит в фазу с волновым вектором \mathbf{k} , тогда как в соединении BiMn_2O_5 переход осуществляется в фазу \mathbf{k} . Однако в оксиде PrMn_2O_5 электрической поляризации нет, тогда как в BiMn_2O_5 она появляется. При этом неприводимые представления пространственной группы Pbam парамагнитной фазы, по которым происходит переход в этих соединениях, для указанных волновых векторов совпадают. Этим представлений два. Установлено, что переходы в этих соединениях происходят по разным неприводимым представлениям. Это обстоятельство кардинально влияет на условия возникновения дальнего сегнетоэлектрического порядка.

Рассмотрены фазовые переходы из парамагнитного состояния в соизмеримую магнитную в соединениях PrMn_2O_5 и BiMn_2O_5 . На основе экспериментальных данных показано, что в PrMn_2O_5 этот переход можно описать на основе эффективного гамильтониана вида [1]

$$H_{\text{eff}} = \int d^d x \left\{ \frac{r}{2} \zeta_1^2 x + \zeta_2^2 x + u_1 [\zeta_1^4 x + \zeta_2^4 x] + u_2 \zeta_1^2 x \zeta_2^2 x + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \zeta_1 x}{\partial x_i} \frac{\partial \zeta_1 x}{\partial x_i} + \frac{\partial \zeta_2 x}{\partial x_i} \frac{\partial \zeta_2 x}{\partial x_i} \right] \right\},$$

с двухкомпонентным параметром порядка (ζ_1, ζ_2) . При этом компоненты параметра порядка могут быть выбраны в виде $\zeta_1 = \alpha \cdot M_{hx} + \beta \cdot M_{fx}$, $\zeta_2 = \alpha \cdot C_x + \beta \cdot C'_x$, где α , β – некоторые константы, а векторы \mathbf{C} , \mathbf{M}_h и \mathbf{C}' , \mathbf{M}_f являются векторами антиферромагнетизма и ферромагнетизма для ионов Mn в позициях 4h и 4f соответственно. Установлено, что в этом случае эффективный гамильтониан не содержит инвариантов, в которые входит вектор электрической поляризации. Таким

образом, в результате перехода в соизмеримую магнитную структуру в оксиде PrMn_2O_5 дальний сегнетоэлектрический порядок не может возникнуть. На основе известных данных ренормгруппового анализа фазовых переходов, описываемых приведенным эффективным гамильтонианом, и типе магнитного упорядочения, полученного из нейтронографических данных, показано [1], что имеет место фазовый переход второго рода в состояние с $\zeta_2 \neq 0$, $\zeta_1 = 0$, которое имеет место при выполнении условий. Учет однопетлевых слагаемых более высокой степени, как известно [2], приводит при выполнении условия $u_2 \geq bu_1$ к возможности реализации перехода первого рода и появлению трикритической точки при знаке равенства в последнем соотношении между параметрами.

В оксиде BiMn_2O_5 имеют место два фазовых перехода при упорядочении спинов ионов Mn в позициях 4h и 4f [3]. При этом в каждом из переходов упорядочиваются спины только одной позиции.

Параметры порядка, описывающие переходы, снова являются двухкомпонентными и могут быть представлены в виде

$$\eta_1 = \alpha \cdot C_x + \beta \cdot M_{hy}, \quad \eta_2 = \alpha \cdot M_{hx} + \beta \cdot C_y, \quad \eta_3 = \gamma \cdot A'_x + \delta \cdot G'_y, \quad \eta_4 = \gamma \cdot G'_x + \delta \cdot A'_y.$$

Здесь векторы антиферромагнетизма \mathbf{A}' и \mathbf{G}' , заданные в стандартных обозначениях, относятся к позиции 4f. Важно отметить, что в эффективном гамильтониане в этом случае появится слагаемое, которое описывает взаимодействие параметров порядка двух переходов, а также инвариант, содержащий компоненту электрической поляризации вдоль оси b кристалла. Этот инвариант не включает градиентов компонент параметра порядка, а, следовательно, не связан с механизмом появления электрической поляризации за счет взаимодействия Дзялошинского - Мория. Оказывается, что и в этом случае имеется возможность реализации перехода из парамагнитного состояния не только как фазового перехода второго рода, но и, при выполнении определенных условий, как фазового перехода первого рода. Таким образом, возможно появление трикритической точки. Изменение рода перехода может происходить вследствие перенормировки параметров эффективного гамильтониана, описывающего переход из парамагнитного состояния, за счет параметров слагаемого, учитывающего взаимодействие параметров порядка двух переходов. Кроме того, ниже точки перехода должна появиться электрическая поляризация, как сопутствующий параметр порядка.

Таким образом, вследствие переходов по разным неприводимым представлениям пространственной группы $P6am$ переход из парамагнитного состояния в магнитоупорядоченную структуру в соединении PrMn_2O_5 электрическая поляризация не может появиться, тогда как в BiMn_2O_5 она возникает, хотя как в первом, так и во втором соединении этот переход может реализоваться по двум разным сценариям.

[1] В.В. Меньшенин, ЖЭТФ, **147** (2015) №5.

[2] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. М., Наука, 1982, 382 с.

[3] A. Munoz, J.A. Alonso, M.T. Casais, M.J Martinez-Lope, J.L. Martinez. Phys. Rev. B **65** (2002) 144423.

Исследование натриевых кобальтатов Na_xCoO_2 методом ЯМРИ.Р. Мухамедшин^{1,2}, Н. Alloul², И.Ф. Гильмутдинов¹, А.В. Дуглав^{1,2}, С.А. Кривенко¹¹Институт физики Казанского федерального университета, 420008 Казань, Россия²Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, 91405 Orsay, Francee-mail: Irek.Mukhamedshin@kpfu.ru

Натриевые кобальтаты Na_xCoO_2 представляют собой сложный оксид кобальта, основу кристаллической структуры которых составляют слои CoO_2 , разделенные плоскостями, содержащими атомы натрия. Подобно ВТСП купратам, уровень допирования слоев CoO_2 дырками может быть изменен в широком диапазоне путем изменения содержания натрия от $x = 0$ до 1. При этом в зависимости от содержания натрия формальное зарядовое состояние атомов кобальта меняется от Co^{3+} ($S=0$) до Co^{4+} ($S=1/2$). Однако если для купратов характерна квадратная подрешетка атомов меди, то в кобальтатах атомы кобальта образуют треугольную подрешетку – типичный элемент фрустрированных магнитных систем. Это приводит к тому, что фазовая диаграмма натриевых кобальтатов значительно сложнее, чем купратов, поскольку включает, кроме сверхпроводящей области, различные упорядоченные состояния. Сверхпроводимость, высокая подвижность ионов натрия, большой коэффициент термо-ЭДС при низком удельном сопротивлении, неоднозначность зарядового состояния кобальта в треугольной кристаллической решетке, возможность существования магнитной фрустрации – все эти факты делают исследования кобальтатов весьма актуальными в современной физике конденсированного состояния.

Нами проводились исследования методами ЯМР/ЯКР различных фаз соединения Na_xCoO_2 с различным содержанием натрия, а также сверхпроводящей фазы $\text{Na}_{0.35}\text{CoO}_2 \cdot 1.3\text{H}_2\text{O}$ с $T_C \sim 4$ К. Показано, что в фазе с $x=0.35$ и сверхпроводящей фазе наблюдается единое зарядовое состояние атомов кобальта и отсутствие упорядочения атомов натрия [1]. Во всех же фазах с содержанием натрия $x > 0.45$ наблюдается упорядочение атомов натрия. Используя метод ЯМР, мы полностью определили структуру упорядочения атомов натрия в соединении $\text{Na}_{2/3}\text{CoO}_2$ и $\text{Na}_{0.77}\text{CoO}_2$. Это упорядочение в $\text{Na}_{2/3}\text{CoO}_2$ приводит к зарядовому расслоению атомов кобальта в плоскостях на две подрешетки: треугольную решетку из немагнитных Co^{3+} и решетку типа “кагомэ”, состоящую из магнитных атомов Co с зарядовым состоянием $3.44+$, для которых экспериментально обнаружена необычно большая анизотропия магнитных свойств [2]. Подобное зарядовое расслоение атомов кобальта на немагнитное состояние Co^{3+} и магнитное с зарядом кобальта $\sim 3.5+$ оказалось характерным для различных фаз натриевых кобальтатов с $x > 0.55$, причем различия в структуре упорядочения атомов натрия обуславливают отличия магнитных свойств различных фаз. Однако, в отличие от ВТСП купратов, в кобальтатах допирование не приводит к увеличению беспорядка в системе, а упорядочение атомов допанта (натрия) приводит к упорядоченному зарядовому расслоению в плоскостях CoO_2 , допированных дырками.

Работа выполнена в рамках программы повышения конкурентоспособности КФУ и при частичной финансовой поддержке РФФИ №14-02-01213а.

[1] I.R. Mukhamedshin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 247602 (2005).[2] I.R. Mukhamedshin and H. Alloul, Phys. Rev. B **84**, 155112 (2011).[3] I.R. Mukhamedshin *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 115151 (2014).

Взаимосвязь структурных, ян-теллеровских и магнитных состояний в слабодопированных лантан-стронциевых манганитах

Х.Г. Богданова¹, А.В. Голенищев-Кутузов², В.А. Голенищев-Кутузов²,
Р.И. Калимуллин², А.В. Семенников²

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН, 420029, ул. Сибирский тракт 10/7, г. Казань, Республика Татарстан, Российская Федерация

² Казанский государственный энергетический университет, 420066, ул. Красносельская 51, г. Казань, Республика Татарстан, Российская Федерация

e-mail: camrosebe@gmail.com

Необычные физические свойства слабодопированных манганитов типа $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($0.10 < x < 0.20$) уже два десятилетия являются объектом многочисленных исследований. В последние годы стало очевидным, что полное и непротиворечивое объяснение природы обнаруженных эффектов невозможно без привлечения процессов ян-теллеровского (ЯТ) искажения октаэдров MnO_6 и различных видов их структурного упорядочения. Причем, если ранее в основном изучалось только кооперативное упорядочение MnO_6 , то сейчас уже установлено возникновение локального упорядочения MnO_6 в виде наноразмерных кластеров, по-видимому, также влияющих на физические свойства манганитов. Наиболее эффективно для изучения особенностей ЯТ эффекта в манганитах используются различные виды рентгеновской, электронной и нейтронной дифракции [1-4]. Однако они обладают достаточной разрешающей способностью только для изучения либо отдельных структурных элементов (MnO_6), либо их кооперативного упорядочения. При локальных упорядочениях ЯТ искаженных MnO_6 в пределах до 100 \AA они менее пригодны вследствие размытия дифракционных сигналов [1]. Поэтому пока были исследованы ЯТ упорядочения MnO_6 только в недопированных образцах LaMnO_3 , а затем с помощью теоретического моделирования экспериментальных результатов была разработана модель температурного изменения кооперативных и локальных упорядоченностей ЯТ искаженных октаэдров MnO_6 [2,4]. Для подобных исследований проявления ЯТ эффекта в слабодопированных манганитах нами был использован комплексный метод, включающий высокочастотную (до 1000 МГц) акустическую спектроскопию, магнитные и резистивные измерения в диапазоне $400\text{--}140 \text{ К}$ [5]. На основе ранее принятой методики [6] определения характера упорядочения MnO_6 по изменению длин связей Mn-O и углов связей Mn-O-Mn ЯТ энергии упорядочения нами была разработана методика оценки этих параметров по измеренным температурным и магнитным изменениям определенного набора упругих модулей C_{ij} . Так, изменение $(C_{11} - C_{12})/2$ характеризует изменение длин связей Mn-O вследствие поперечной деформации C_{ij} , изменение C_{44} соответствует отклонению углов связей от 180° , объемный модуль C_V отражает изменение объема образца при кооперативном упорядочении. Изменения длин связей при ЯТ переходах определялись по значениям соответствующих деформаций (e), пропорциональных смягчению упругих модулей.

Таким образом, на основе измерения температурных и полевых зависимостей модулей C_{11} , $(C_{11} - C_{12})/2$, C_{44} , C_V при напряженности поля до 1.5 Тл с использованием модели ЯТ упорядочений для LaMnO_3 [2,4] были сделаны определенные выводы и предположения, распространяющиеся на ряд слабодопированных $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.125, 0.15, 0.175$). Они касаются не только видов ЯТ упорядочений, но и их влияния на некоторые физические свойства данного класса манганитов.

Возникновение ЯТ искажений индивидуальных октаэдров MnO_6 происходит скорее всего вблизи высокотемпературного структурного перехода от квазикубической (К) к ромбоэдрической (Р) фазе. Структура и степень деформации отдельных MnO_6 практически мало зависят от температуры, кристаллического и магнитного состояний, но e уменьшается с ростом x . Первичное образование локальных упорядочений среди ЯТ искаженных MnO_6 (кластеров) начинается еще в Р фазе, причем размеры кластеров возрастают с понижением температуры. При переходе в орторомбическую фазу О кластеры увеличиваются до 100 Å, но общие размеры образцов сохраняются. Для образцов с $0.12 < x \leq 0.15$ внутри фазы О при понижении температуры возникает резкое и значительное изменение всех модулей C_{ij} , сопровождающееся значительным повышением электросопротивления ρ . Эти скачкообразные изменения C_{ij} и ρ , включая их гистерезисный характер, позволили представить их как проявление ЯТ кооперативного структурного фазового перехода первого рода с искажением формы образца и превращением кластеров в единый домен. Поэтому ЯТ кооперативное упорядочение можно отнести к самостоятельной структурной фазе О'. (Для $x = 0.125$ $T_{\text{ЯТ}} = 280$ К, для $x = 0.15$ $T_{\text{ЯТ}} = 180$ К). При дальнейшем понижении температуры возникающее ферромагнитное упорядочение конкурирует с ЯТ упорядочением и подавляет его, что отражается в переходе О' → О. Оба ЯТ перехода О → О' и О' → О относятся к типу переходов «порядок–беспорядок», но первый из них имеет спонтанный характер, а второй – вынужденный переход под действием ферромагнитного упорядочения. Повышение точки Кюри до 277 К для образца с $x = 0.175$ приводит к подавлению ЯТ кооперативного упорядочения с сохранением элементов локального упорядочения. Приложение сильного магнитного поля приводит к подавлению и локального упорядочения, причем совокупность температурных характеристик ЯТ и магнитных фаз свидетельствует в пользу предложенного механизма колоссального магнитосопротивления – подавления локального ЯТ упорядочения внешним полем в условиях спонтанного ферромагнитного упорядочения.

- [1] J. Geck, P. Wochner, D. Bruns, B. Buchner, U. Gebhardt, S. Kiele, P. Reutler, A. Revcolevschi // *Phys. Rev. B* **69**, 104413 (2004).
- [2] Qiu Xiangyun, Th. Proffen, J.F. Mitchell, S.J.L. Billinge // *Phys. Rev. Lett.* **94**, 177203 (2005).
- [3] E.S. Bozin, M. Schmidt, A.J. DeConinck, G. Paglia, J.F. Mitchell, T. Chatterji, P.G. Radaelli, Th. Proffen, S.J.L. Billinge // *Phys. Rev. Lett.* **98**, 137203 (2007).
- [4] A. Sartbaeva, S.A. Wells, M.F. Thorpe, E.S. Bozin, S.J.L. Billinge // *Phys. Rev. Lett.* **99**, 155503 (2007).
- [5] А.Р. Булатов, Х.Г. Богданова, В.А. Голенищев-Кутузов, Л.В. Елохина, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев // *ФТТ* **52**, 2238 (2010).
- [6] T.W. Darling, A. Migliori, E.G. Moshopoulou, Stuart A. Trugman, J.J. Neumeier, J.L. Sarrao, A.R. Bishop, J.D. Thompson // *Phys. Rev. B* **57**, 5093 (1998).

Оценка влияния различных механизмов на магнитосопротивление манганитов лантана состава $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$ с активационным типом проводимости

С.А. Гудин, М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев, Н.Н. Гапонцева,
Н.А. Угрюмова

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева

e-mail: gudin@imp.uran.ru

Предложен метод оценки эффективности следующих механизмов магнитосопротивления (1) манганитов лантана: механизма обменного подмагничивания спинов носителей тока спинами носителей магнитного момента (s-d механизм); механизма шунтирования высокоомных областей вещества низкоомными, включая эффект протекания; механизм возрастания электросопротивления ферромагнитных областей при разориентировании их магнитных моментов.

$$\Delta\rho / \rho = (\rho(0) - \rho(\mathbf{H})) / \rho(\mathbf{H}), \quad (1)$$

$\rho(\mathbf{H})$ - зависимость электросопротивления от магнитного поля \mathbf{H} .

Механизм s-d подмагничивания (2), существующий в однородных ферромагнетиках, имеет особенность, обусловленную особенностью Кюри-Вейса магнитной восприимчивости.

$$(\Delta\rho / \rho)_{s-d} = \frac{2\mu_B H_E}{k_B T} \cdot \frac{\chi(T)H}{M_0}, \quad (2)$$

μ_B - магнетон Бора, k_B - константа Больцмана, T – температура в К, H_E - эффективное поле обменного подмагничивания носителей тока, $\chi(T)$ - магнитная восприимчивость, M_0 – намагниченность насыщения при $T=0$.

Механизм шунтирования считается основным для манганитов, испытывающих переход диэлектрик-металл. Предполагается, что этот механизм обеспечивает колоссальное магнитосопротивление благодаря эффекту протекания.

Третий механизм условно назван механизмом ГМС, поскольку он определяет эффект гигантского магнитосопротивления в многослойных пленках, состоящих из ферромагнитных нанослоев, разделенных неферромагнитными нанопрослойками.

Предложенный метод оценки применен для анализа магнитосопротивления манганита состава $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$ с активационным типом проводимости, исключая переход диэлектрик-металл. Проведены измерения и расчет (в рамках s-d модели) зависимостей удельного электросопротивления и намагниченности в интервале температур $200 \text{ K} \leq T \leq 320 \text{ K}$ при значениях магнитного поля от 0 до 50 кЭ. Показано [1], что магнитосопротивление этого манганита при температурах $T < T_C/2$ (T_C – температура Кюри) описывается одним s-d механизмом, причем без подгоночных параметров и в пределах погрешностей измерений. Иначе формируется магнитосопротивление этого манганита вблизи температуры T_C [2], [3]. Установлено, что при таких температурах все три механизма (s-d, шунтирование и ГМС) вносят в него сравнимый по величине вклад.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект 14-02-00260), УрО РАН (проект 15-8-2-10).

- [1] И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев и др. ФТТ, 53, 896 (2013).
- [2] М.И. Куркин, Э.А. Нейфельд, А.В. Королев и др. ЖЭТФ, 143, 948 (2013).
- [3] S.A. Gudin, N.N. Gapontseva, E.A. Neifeld, A.V. Korolev, and N.A. Ugryumova, "Bulletin of the Russian Academy of Sciences". Physics, Vol.78, No.9, P.900–904, 2014.

Низкотемпературный межгранульный спиновый транспорт в манганите $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.4}\text{Li}_{0.1}\text{MnO}_3$ в сильных магнитных полях (до 14 Т)

А.Г. Гамзатов¹, Т.А. Гаджимурадов¹, Renwen Li²

¹Институт физики им Х.И. Амирханова ДНЦ РАН, 367003, Махачкала, Россия

²High Magnetic Field Laboratory, Chinese Acad. of Sci., Hefei, China

e-mail: gamzatov_adler@mail.ru

В данной работе рассматривается анализ низкотемпературного минимума на температурной зависимости электросопротивления в манганите $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.4}\text{Li}_{0.1}\text{MnO}_3$.

Экспериментально наличие минимума при низких температурах на температурной зависимости электросопротивления наблюдается для большинства манганитов керамической природы. Однако, вопрос интерпретации низкотемпературного минимума остается дискуссионным, и до сих пор нет единого мнения относительно механизма возникновения низкотемпературного минимума в электросопротивлении манганитов [1-10]. Наличие минимума сопротивления при низких температурах или же рост сопротивления с понижением температуры при $T \rightarrow 0$ наблюдались в большинстве магнитных материалах различной природы. По природе наблюдаемых минимумов в магнитных материалах их можно разделить на два вида: 1) минимум, связанный с межгранульным спин-поляризованным транспортом (для магнитных материалов керамической природы и гранулированных структур); 2) минимум или рост сопротивления, связанный с возникновением межатомного антиферромагнитного обмена между магнитными моментами соседних атомов (типа эффекта Кондо). Возможен и третий, комбинированный вариант, когда оба эти механизма сосуществуют.

В данной работе в рамках модели межгранульного спин-поляризованного транспорта (СПТ) проведен подробный анализ низкотемпературного минимума на температурной зависимости электросопротивления манганита $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.4}\text{Li}_{0.1}\text{MnO}_3$ в интервале температур $5 < T < 50$ К в сильных магнитных полях (1 Т до 14 Т).

Суть модели СПТ заключается в том, что при низких температурах в нулевом магнитном поле ферромагнитные моменты отдельных гранул ориентируются таким образом, что носители заряда на ближайших границах зерен имеют противоположно направленные спины и остаются неподвижными. Такое антиферромагнитное расположение магнитных моментов означает наличие энергетического барьера для носителей заряда на границе между двумя гранулами. С ростом температуры тепловая энергия “размораживает” магнитные моменты соседних гранул, помогая носителям тока перескочить энергетический барьер под действием электрического поля, что приводит к уменьшению сопротивления с ростом температуры (наличие минимума).

Для описания межгранульного транспорта мы используем наинизшее и самое простое приближение, в котором в эффективной проводимости σ преобладающим является вклад от пар зерен (спиновых димеров) [1, 2]. Электросопротивление для такого димера записывается следующим образом [1]:

$$\rho_{\text{eff}}(T, H) = \frac{\rho_0(T)}{1 + \epsilon \langle \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 \rangle_{T, H}}, \quad (1)$$

$$\Delta\rho/\rho = [\rho_{\text{eff}}(T, H)/\rho_{\text{eff}}(T, 0)] - 1 \quad (2)$$

где $\rho_0^{-1}(T) = \sigma_0 \langle e^{-k|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \rangle_{\text{pairs}}$, усреднение производится по пространственному распределению димеров и тепловых флуктуаций потенциального барьера внутри зерна;

$\langle \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 \rangle_{T,H}$ - является термодинамическим усреднением по состояниям димера при заданных температуре T и магнитном поле H . Флуктуации обменного взаимодействия между спинами зерен и их длинами S пренебрегаем.

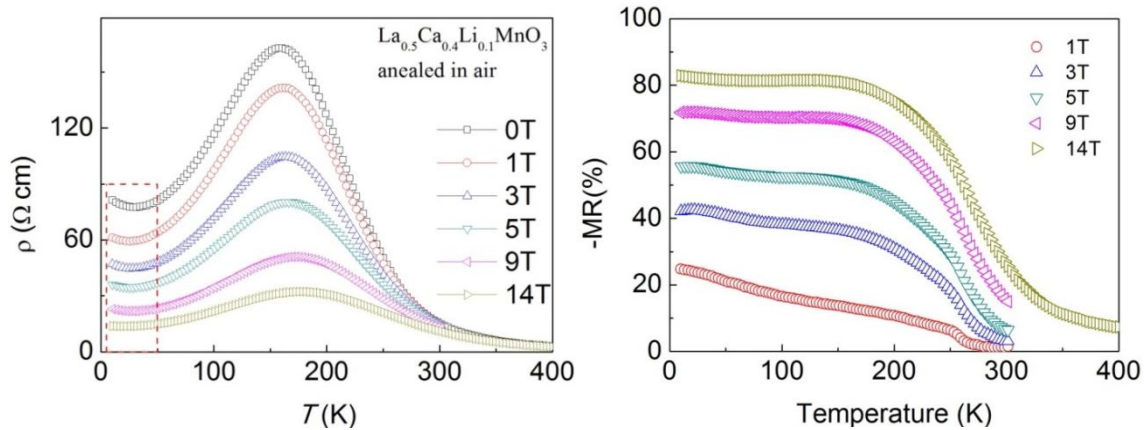


Рис.1. Температурные зависимости электросопротивления и магнитосопротивления $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.4}\text{Li}_{0.1}\text{MnO}_3$.

На рис.1 приведены экспериментальные температурные зависимости электросопротивления и магнитосопротивления в интервале температур 10-400 К и в магнитных полях до 14 Т. Общая картина поведения электросопротивления и магнитосопротивления имеет характерный для большинства манганитов керамической природы вид.

На рис. 2 приведены результаты аппроксимации экспериментальных данных $\rho(T)$ в интервале температур 10-50 К и в магнитных полях $H=0, 1, 3, 5, 9$ и 14 Т с помощью формул (1) и (2). Как видим из рисунка, используемая модель достаточно хорошо описывает экспериментальные результаты, как в зависимости от температуры, так и в зависимости от магнитного поля.

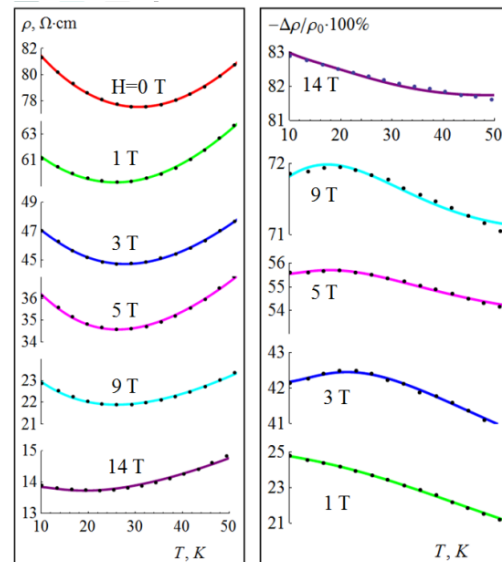


Рис.2. Зависимость $\rho(T)$ и $MR(T,H)$ в интервале температур 10-50 К; сплошные линии соответствуют аппроксимации с помощью формул (1) и (2).

Исследования выполнены при финансовой поддержке программы ОФН РАН «Сильно коррелированные электроны в твердых телах и структурах».

[1] E. Rozenberg, M. Auslender, et al., Journal of Applied Physics, 88, 2578 (2000).
 [2] E. Rozenberg, A.E. Kar'kin, et al., Journal of Alloys and Compounds 326, 81 (2001).
 [3] M. Auslender, A.E. Kar'kin, et al., Journal of Applied Physics 89(11), 6639 (2001).
 [4] P. Raychaudhuri, K. Sheshadri, et al., Physical Review B, 59(21), 13919 (1999).
 [5] А.Г. Гамзатов, А.Б. Батдалов, и др., ФНТ, 35 (3), 290 (2009).
 [6] S. Das, T.K. Dey, Bulletin of Materials Science 29(6), 633 (2006).
 [7] Yan Xu, Jincang Zhang, et al., Physical Review B 73, 224410 (2006).
 [8] G. Lalitha, P. Venugopal Reddy, Journal of Alloys and Compounds 494, 476 (2010).
 [9] L. Balcells, J. Fontcuberta, et al., Physical Review B, 58(22), R14697 (1998).
 [10] M. Garcia-Hernandez, F. Guinea, et al., Physical Review B, 61(14), 9549 (2000).

Аномальные магнитные свойства парамагнитной фазы и спиновые поляроны в твердых растворах замещения $Mn_{1-x}Fe_xSi$

С.В. Демишев^{1,2}, И.И. Лобанова², В.В. Глушков^{1,2}, В.Ю. Иванов¹, Т.В. Ищенко¹,
А.Н. Самарин^{1,2}, Н.Е. Случанко¹, С.В. Григорьев³

¹ Институт общей физики РАН, 119991, ул. Вавилова, 38, Москва, Россия

² Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный, Россия

³ Петербургский институт ядерной физики, 188300 Санкт-Петербург, Россия

e-mail: demis@lt.gpi.ru

Необычная T - x магнитная фазовая диаграмма твердых растворов замещения $Mn_{1-x}Fe_xSi$ характеризуется наличием двух квантовых критических точек $x^* \sim 0.11$ и $x_c \sim 0.24$, причем переход между высокотемпературной парамагнитной фазой и фазой со спиральным магнитным порядком осуществляется через промежуточную магнитную фазу киральной спиновой жидкости (CSL) [1,2]. Более того, в интервале составов $x^* < x < x_c$ дальний магнитный порядок отсутствует, и основной низкотемпературной фазой оказывается фаза CSL [1], которая представляет собой аналог голубой фазы в жидких кристаллах [3]. Целью настоящей работы является исследование магнитных свойств парамагнитной (PM) фазы в системе $Mn_{1-x}Fe_xSi$, которую до настоящего времени было принято рассматривать в качестве классического примера, подтверждающего спин-флуктуационную теорию зонного магнетизма Мории [4]. Анализ температурных ($T < 60$ К) и полевых ($B < 5$ Тл) зависимостей намагниченности $M(B, T)$ у твердых растворов $Mn_{1-x}Fe_xSi$ в области составов $x < 0.3$ показал, что намагниченность в PM фазе демонстрирует скейлинговое поведение вида $B \partial M / \partial B - M = F(\xi)$, где переменная $\xi = \mu^* B / k_B (T - T_s)$ зависит от эффективного магнитного момента μ^* и от температуры PM-CSL перехода $T_s(x)$, а $F(\xi)$ обозначает универсальную функцию для данного состава. Выполнение скейлинговых соотношений приводит к выводу о том, что намагниченность в парамагнитной фазе $Mn_{1-x}Fe_xSi$ является суммой двух вкладов $M = M_1 + M_2$. Первый вклад M_1 насыщается по скейлинговой переменной ξ и характеризуется намагниченностью насыщения M_0 , в то время как второй вклад линейно зависит от магнитного поля $M_2 \sim B$. Сравнение скейлинговых функций $F(\xi)$ для различных образцов $Mn_{1-x}Fe_xSi$ показывает, что совокупность магнитных данных для $x < 0.3$ может быть описана с помощью единого, не зависящего от x ,

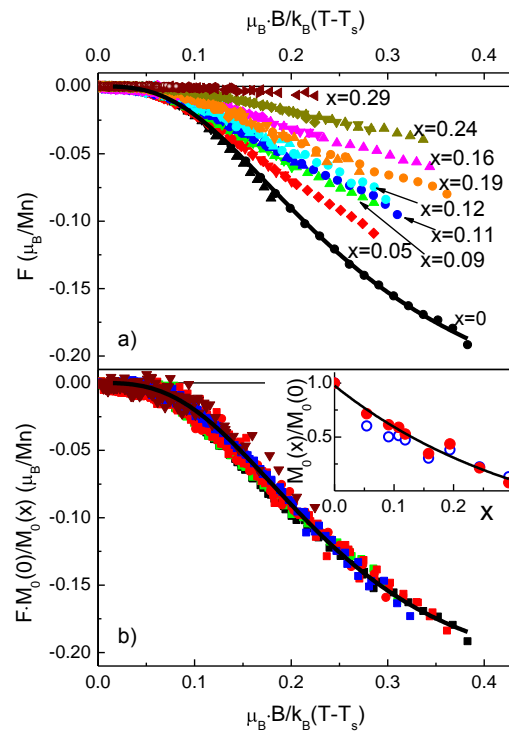


Рис. 1. Скейлинговая функция для образцов различного состава (a) и ее нормировка на намагниченность насыщения (b). Точки - эксперимент, сплошная линия - модельный расчет. На вставке показана концентрационная зависимость $M_0(x)$.

эффективного магнитного момента μ^* , и, следовательно, отношение скейлинговых функций для различных составов позволяет восстановить концентрационную зависимость $M_0(x)$ (Рис. 1). Найдено, что насыщающийся вклад может быть хорошо описан аналитическим выражением $M_1 = M_0 \text{th}[\mu^* B / k_B(T - T_s)]$, которое позволяет получить оценку $\mu^* = (5.6 \pm 0.4)\mu_B$ и $M_0(0) = (0.21 \pm 0.03)\mu_B/\text{Mn}$ (соответствующая M_1 функция $F(\xi)$ для данных значений μ^* и $M_0(0)$ показана на Рис. 1 сплошной линией).

Рассмотрены возможные интерпретации совокупности обнаруженных аномалий (два магнитных вклада, аномально большой эффективный магнитный момент $\mu^* \gg \mu_B$ в сочетании с малой величиной намагниченности насыщения $M_0 \ll \mu_B$ в расчете на магнитный ион марганца). Показано, что ни теория зонного магнетизма [4], ни кластерный подход не позволяют объяснить экспериментальные данные, а их адекватное описание возможно в рамках спин-поляронной модели [5], в которой спиновый полярон представляет собой квазисвязанное состояние зонного электрона и локализованного магнитного момента Mn. Найдено, что учет специфических взаимодействий для простой спиновой конфигурации ферримагнитного типа, характеризующей спиновый полярон (Рис. 2), позволяет объяснить экспериментальные данные, причем наблюдаемые значения μ^* не связаны с большими локализованными магнитными моментами в объеме образца. В рамках развитого подхода два магнитных вклада соответствуют случаю, когда только часть ионов марганца участвует в образовании спиновых поляронов и в системе возникает магнитное фазовое расслоение на нанометровой шкале. При этом спин-поляронный вклад можно отождествить с насыщающимся по переменной ξ магнитным вкладом. Показано, что параметры μ^* и $M_0(0)$ выражаются через магнитный момент зонного электрона μ_e и локализованный магнитный момент иона марганца μ_{Mn} , а также зависят от угла θ_1 , описывающего спиновую конфигурацию (см. Рис.2)

$$\mu^* = \mu_e / f(\theta_1), \quad M_0(0) = (\mu_{\text{Mn}}^2 / \mu_e) f(\theta_1) / \text{Mn}, \quad (1)$$

$$f(\theta_1) = \cos\theta_1 - \sqrt{(\mu_e / \mu_{\text{Mn}})^2 - \sin^2\theta_1}, \quad \sin\theta_2 = -(\mu_{\text{Mn}} / \mu_e) \sin\theta_1. \quad (2)$$

Если $\mu_e \approx \mu_B$, то для описания экспериментальных значений μ^* и $M_0(0)$ необходимо положить $\theta_1 \approx 55^\circ$ и $\mu_{\text{Mn}} \approx 1.1\mu_B$. Отметим, что найденное значение μ_{Mn} находится в хорошем согласии с результатами LDA-расчетов, согласно которым $\mu_{\text{Mn}} = 1.2\mu_B$ [6].

Полученные данные показывают, что РМ фазу у $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ следует рассматривать как фазу, физические свойства которой определяются магнитными неоднородностями на нанометровом пространственном масштабе и, в рамках аналогии между спиральными магнетиками и жидкими кристаллами [3], парамагнитную фазу в исследуемой системе можно сопоставить с фазой изотропной жидкости.

Работа поддержана грантом РФФИ 13-02-00160 и программами РАН «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии» и «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием».

[1] S.V. Demishev, et al., JETP Lett. **98**, 829 (2013).

[2] S.V. Grigoriev, et al., Phys. Rev. B **83**, 224411 (2011).

[3] S. Tewari, et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 047207 (2006).

[4] T. Moriya, *Spin fluctuations in itinerant electron magnetism*, Springer-Verlag, 1985.

[5] S.V. Demishev, et al., Phys. Rev. B **85**, 045131 (2012).

[6] M. Corti, et al., Phys. Rev. B **75**, 115111 (2007).

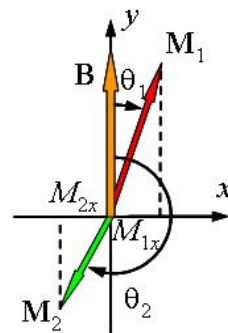


Рис. 2. Спиновая конфигурация в модели спинового полярона.

Thermodynamic Properties of TbTe₃

O. Volkova¹, A. Sinchenko², P. Monceau³, P. Lejay³, D. Chareev⁴, A. Vasiliev¹

¹Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

²Institute of Radio Engineering and Electronics of RAS, 125009 Moscow, Russia

³University of Grenoble Alpes, Inst. Neel, F-38042 Grenoble France

⁴Institute of Experimental Mineralogy, 142432 Chernogolovka, Russia

e-mail: volkova@mig.phys.msu.ru

Rare earth tritellurides RTe₃ (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, and Tm) are two – dimensional materials. The crystal structure is organized by corrugated RTe slab and two sheets of nominally square Te planes stacking along b – axis. It is of orthorhombic type but with tiny difference between a and c crystal lattice parameters. Figure 1 represents unit cell and structure of RTe slabs along with Te layers for TbTe₃ ($a = 4.2995 \text{ \AA}$, $b = 25.4200 \text{ \AA}$, $c = 4.3078 \text{ \AA}$, Cmc21) [1]. Terbium atoms at the distance of 3.3318 \AA form one – dimensional chains along the c- axis. For the most of rare earths these materials have incommensurate lattice modulation at room temperature with a single in-plane wave vector $q_1 = (2/7)c^*$. The heaviest members of series R = Dy, Ho, Er and Tm mark the onset of a second charge density wave transition with a wave vector $q_2 = (1/3)a^*$ [2]. Unresolved issue still remains concerning phase transitions in TbTe₃. It experiences upper charge density wave transition at 336 K. While the lower one was found at 165 K [3] or postulated to be absent [2]. Three low temperature anomalies examined in specific heat measurements distinguishes TbTe₃ in the RTe₃ family of compounds as shown in Figure 2. The amplitude of specific heat changes is extremely high. This data contradict to neutron scattering studies which unveiled only two magnetic phase transitions [4]. Besides, only TbTe₃ demonstrates transition to a superconducting state at low temperatures under pressure [5]. In present study we intend to set up the magnetic phase diagram in TbTe₃ under action of external magnetic field which is rather complicated revealing probably competition of various order parameters.

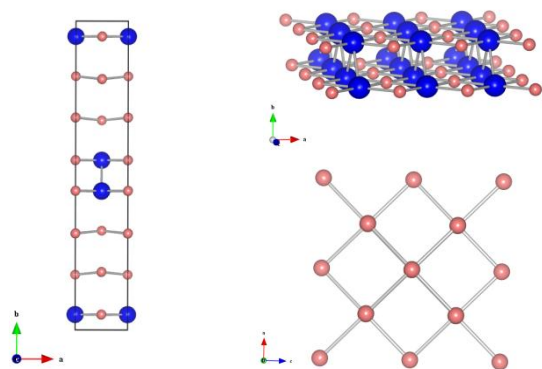


Figure 1. Unit cell of TbTe₃ (left panel), TbTe slab (upper right panel) and Te square layer (lower right panel). The larger spheres denote Te, while smaller are Tb.

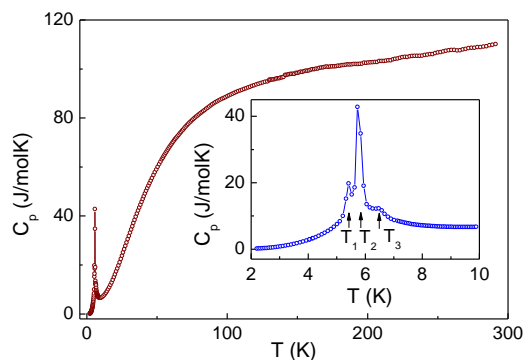


Figure 2. The temperature dependence of specific heat of TbTe₃ measured at B = 0T. The inset represents enhanced low temperature region revealing the presence of three phase transitions at low temperatures.

[1] C.D. Malliakas, M.G. Kanatzidis, J. Am. Chem. Soc 128, 12612-12613 (2006).

[2] N. Ru, J.-H. Chu, and I.R. Fisher, Phys. Rev. B 78, 012410 (2008).

[3] R.Y. Chen et al., Phys. Rev. B 89, 075114 (2014).

[4] F. Pfuner et al., J. Phys. Condens. Matter 24, 036001 (2012).

[5] J.J. Hamlin, Phys. Rev. Lett. 102, 177002 (2010).

Синтез и магнитные свойства пленок [(CoP)_{soft}/NiP/(CoP)_{hard}/NiP]_nГ.С. Патрин^{1,2}, Я.Г. Шиян^{1,2}, К.Г. Патрин^{1,2}, Г.Ю. Юркин¹¹ Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Россия² Сибирский федеральный университет, 660041, пр. Свободный, 79, Красноярск, Россияe-mail: patrin@iph.krasn.ru

Многослойные пленочные магнитные структуры привлекают внимание исследователей, поскольку, комбинируя очередность нанесения слоев, материалы как магнитного, так и немагнитного слоев, а также подбирая количество слоев в структуре, можно создавать материалы, обладающие уникальными свойствами. Интерес к системам, обладающим спин-вентильным эффектом, обусловлен их практическим использованием в устройствах спиновой электроники. Изучению механизмов намагничивания в многослойных пленочных структурах, полученных методом химического осаждения, с чередующимися слоями из магнитомягкого и магнито жесткого слоев и посвящено данное сообщение.

Пленки [(CoP)_{soft}/NiP/(CoP)_{hard}]_n были получены методом химического осаждения. Содержание фосфора во всех слоях составляло 8 % ат. В магнито жестком слое CoP был в гексагональном поликристаллическом состоянии, в магнитомягком слое CoP находился в аморфном состоянии. Толщина каждого слоя была $t_{\text{CoP}} = 5$ nm. Промежуточный слой NiP $t_{\text{NiP}} = 2$ nm находился в аморфном состоянии и был немагнитный. Толщины слоев выбирались из условия, чтобы энергия межслоевого взаимодействия была сравнима с магнитной энергией ферромагнитного слоя, и эффекты межслоевого взаимодействия не маскировались другими взаимодействиями. Измерения выполнены на установке MPMS-XL при температурах $T = 4.2 \div 300$ K.

Для одиночного магнитомягкого слоя CoP_{soft} температурное поведение петель намагниченности носит характер, типичный для магнитомягкого ферромагнетика, при этом коэрцитивная сила ($H_c(T=77,4 \text{ K}) \cong 15$ Oe) уменьшается более чем на порядок при повышении температуры от азотной до комнатной. Для магнито жесткого слоя CoP_{hard} поведение также является ферромагнитным, только в этом случае H_c примерно на полтора порядка больше. Ситуация заметно меняется, когда из этих слоев складывается сэндвич. В результате наблюдается не алгебраическая сумма исходных кривых, а вся двухслойная структура ведет как единая пленка с сильным межслоевым взаимодействием.

Введение немагнитного слоя NiP заметно меняет ситуацию. При небольших количествах структурных блоков (малые значения n), когда взаимное влияние магнитомягкого и магнито жесткого слоев «ослаблено» добавлением немагнитного слоя, суммарная ширина петли больше, чем в случае $t_{\text{Ni}} = 0$ nm. Для пленок с $n > 10$ ширина гистерезиса уменьшается при увеличении количества блоков структуры, однако ступенчатый вид кривой намагничивания сохраняется.

Такое поведение можно понять, если предположить, что существует дальнедействующее взаимодействие, которое проникает через несколько блоков, причем межслоевое взаимодействие по порядку величины сравнимо с внутрислоевым обменным взаимодействием. Также установлено, что увеличение числа блоков до 40 ведет к проявлению эффекта типа магнитной пружины, когда весь магнитомягкий слой перемагничивается в малых полях, а область, прилегающая к магнито жесткому слою, удерживается намагниченностью CoP_{hard}.

Настоящие исследования поддержаны РФФИ (проект №. 14-02-00238-а).

Slave-Boson Approach to Incommensurate Magnetic States and Metal-Insulator Transition in Hubbard Model

P.A. Igoshev¹, M.A. Timirgazin², V.F. Gilmutdinov², A.K. Arzhnikov², V.Yu. Irkhin¹

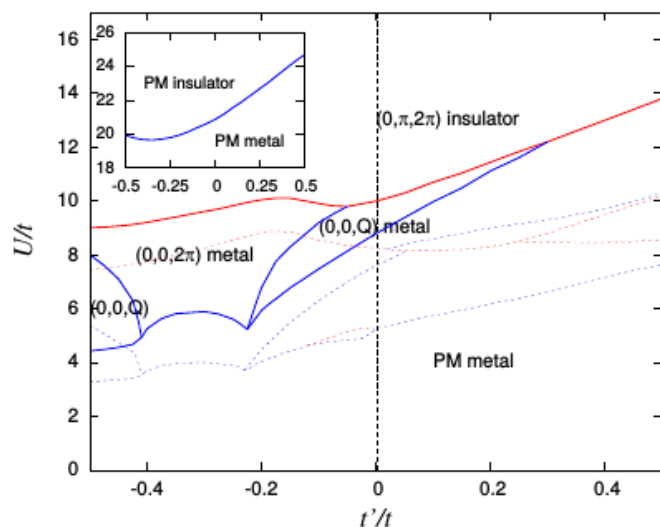
¹ Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia

² Physical-Technical Institute, Izhevsk, Russia

e-mail: timirgazin@gmail.com

The magnetic phase diagram of a single-band Hubbard model contains rich physics and continues to be actively studied. We use the slave-boson method [1] to investigate an incommensurate (spiral) magnetic order in the ground state of the Hubbard model for 2D square [2] and 3D cubic lattices in a wide range of the electron concentration n and Coulomb interaction U parameters. The magnetic phase diagrams are constructed for different values of the ratio between the next-nearest-neighbors and the nearest-neighbors transfer integrals t'/t with account of the magnetic phase separation [2].

It is shown that the correlation effects lead to a strong suppression of the regions of the existence of the magnetic phases, but near half-filling they only slightly change the Hartree-Fock results, so that at small t'/t the sequences of magnetic states do not change with increasing U . The correlation effects are shown to be negligible for the ferromagnetic state in the case of a large density of states, and for the spiral states if the Fermi surface nesting with corresponding \mathbf{Q} vector is present. When the system is far from half-filling and the Fermi level is far from van Hove singularities, the magnetic state cannot form at any U .



When the system is far from half-filling and the Fermi level is far from van Hove singularities, the magnetic state cannot form at any U .

Fig. 1. Magnetic phase diagram of the Hubbard model at half filling in t'/t — U/t plane for fcc lattice. The first-order metal-insulator transition is shown by red solid line. Spiral magnetic states are denoted by their wave vectors (Q_x, Q_y, Q_z) . The inset depicts the Brinkman-Rice paramagnetic metal-insulator transition.

For all the lattices the metal-insulator transition at half-filling is studied for different t'/t . It is shown that in all the cases a magnetic metal-insulator transition takes place at much lower values of U/t than the Brinkman-Rice paramagnetic metal-insulator transition. For the most interesting case of fcc lattice the large- U insulator magnetic state is found to be non-collinear antiferromagnet with a wave vector $(0, \pi, 2\pi)$ (Fig. 1). This ground-state phase should be taken into account in both theoretical and experimental investigations.

This work is supported by Ural Branch of RAS in projects of 15-8-2-9 and 15-8-2-12, and by Russian Foundation of Basic Research in project of 14-02-31603-mol-a

[1] G. Kotliar and A.E. Ruckenstein. *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).

[2] P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, A.K. Arzhnikov and V.Yu. Irkhin. *JETP Letters*, **98**, 150 (2013).

Спиновый ток, индуцированный термическим возмущением в гибридных наноструктурах

И.И. Ляпилин, М.С. Огороков, В.В. Устинов

ИФМ УрО РАН, 620137, С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, Россия

e-mail: lyapilin@imp.uran.ru

Открытие спиновых аналогов термоэлектрических коэффициентов Зеебека, Пельте показало, что термические возмущения, как и возмущения механического вида, оказывают воздействие на спиновые степени свободы носителей заряда. Однако, как показал анализ, наблюдаемый спиновый эффект Зеебека (СЭЗ) в системе (LaY₂Fe₅O₁₂) [1] не может быть описан в рамках стандартных подходов описания термоэлектрических эффектов [2]. В непроводящих магнитных материалах реализация СЭЗ связана с возбуждением системы локализованных спинов. При этом реализуется новый тип спинового тока: спин-волновой, основу которого составляют возбуждения подсистемы локализованных спинов (магноны).

Нами развито микроскопическое описание спиновых эффектов, индуцированных термическим возмущением, в гибридных наноструктурах. Рассмотренная модель состоит из нормального металла и ферромагнитного диэлектрика, находящегося в неоднородном температурном поле. Считалось, что в нормальном металле имеет место спиновая аккумуляция. Электроны проводимости нормального металла на границе интерфейса обменным взаимодействием связаны с подсистемой локализованных спинов ферромагнитного диэлектрика. Неупругое рассеяние электронов на локализованных спинах, сопровождаемое рождением (аннигиляцией) магнонов, приводит к отклонению системы локализованных спинов от равновесного состояния. В качестве дополнительного механизма рассеяния магнонов рассмотрено магнон-фононное взаимодействие. Каждая из подсистем (электронная, магнонная и фононная) характеризовалась своей температурой: спиновая подсистема электронов проводимости – температурой $\beta_s^{-1} = T_s$; подсистема локализованных спинов – температурой $\beta_m^{-1} = T_m$, а решеточная (фононная) $\beta_p^{-1} = T_p$.

Рассмотрение спин-температурных эффектов требует корректного описания термических возмущений. Существует несколько возможных сценариев учета таких возмущений [3]. Для анализа термо-спин эффектов мы применили метод неравновесного статистического оператора (НСО) [4], который дает универсальное построение отклика слабонеравновесных систем на возмущения термического типа. Явный вид НСО, удовлетворяющего уравнению Лиувилля, представим в виде:

$$\rho(t) = \rho_q(t) - \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon t'} e^{iL t'} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + iL \right) \rho_q(t+t') + \dots, \quad \rho_q(t) = \rho_0 - \int_0^1 \rho_0^\lambda \delta S(t) \rho_0^{1-\lambda} d\lambda + \dots, \quad \rho_0 = e^{-S_0} \quad (1)$$

где $\delta S(t) \approx S(t) - S_0$ – малое отклонение неравновесной энтропии от равновесной, L – оператор Лиувилля: $\exp(itL)A = \exp(itH/\hbar)A \exp(-itH/\hbar)$, ρ_0 – оператор равновесного распределения Гиббса.

В приближении эффективных параметров выражение для отклонения энтропии может быть представлено в виде

$$\delta S = \Delta \int d\vec{r} \{ \delta \beta_s(\vec{r}) H_s(\vec{r}) - \beta \sum_\nu N_e^\nu(\vec{r}) \delta \mu_e^\nu(\vec{r}) + \delta \beta_m(\vec{r}) H_m(\vec{r}) + \delta \beta_p(\vec{r}) H_p(\vec{r}) \}, \quad (2)$$

где $\Delta A = A - Sp(\rho_0 A)$, $\delta\beta_i = \beta_i - \beta$, ($i = s, m, p$), $\beta^{-1} = T$. $\delta\mu_e^v = \mu_e^v - \mu_e$, ($v = \uparrow, \downarrow$) – отклонение химического потенциала от равновесного значения. Оператор плотности числа электронов – $N_e(r)$, операторы плотности энергии подсистем – $H_s(r), H_m(r), H_p(r)$. Найдя явный вид оператора $\rho(t)$ и усреднив с ним операторные уравнения движения для подсистем (i, m), мы построили макроскопические уравнения, имеющие смысл локальных законов сохранения плотности энергии подсистем. Так, для магнитной подсистемы имеем:

$$\langle \dot{H}_m(\vec{q}) \rangle = L_{\text{diff}} \delta\beta_m(\vec{q}) - L_{\text{торк}}^e \beta \delta\mu_e(\vec{q}) + L_{\text{торк}}^e \delta\beta_{s,m}(\vec{q}) + L_{\text{торк}}^p \delta\beta_{p,m}(\vec{q}). \quad (3)$$

Здесь $\delta\beta_{i,k} = \beta_i - \beta_k$ и

$$L_{\text{diff}} = -\frac{q^\alpha q^\lambda}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (I_m^\alpha(\vec{q}), I_m^\lambda(-\vec{q})), \quad L_{\text{торк}}^e = \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{H}_{m,ms}(\vec{q}), \dot{H}_{s,ms}(-\vec{q})),$$

$$L_{\text{торк}}^p = \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{H}_{m,mp}(\vec{q}), \dot{H}_{p,mp}(-\vec{q})).$$

$$(A, B) = \int_0^1 d\lambda Sp \{ AB(i\hbar\lambda\beta + t') \rho_0 \}. \quad I_m(q) = (\hbar\omega_m / M) \sum_j S_j^z \{ P_j; \delta(x - x_j^v) \} - \text{плотность}$$

потока магнотонной энергии в подсистеме (m). $H_{\lambda,\lambda k} = (i\hbar)^{-1} [H_\lambda, H_{\lambda k}]$, $H_{\lambda k}$ – описывает взаимодействие между подсистемами (λ) и (k).

Первое слагаемое в правой части макроскопического уравнения (3) описывает диффузию магнонов, обусловленную градиентом температуры. Остальные определяют влияние электронной (спиновой) и решеточной (фононной) подсистем на изменение энергии магнотонной подсистемы посредством взаимодействия с ней. При этом роль спиновой подсистемы сводится к генерации магнонов вследствие неупругого рассеяния их на интерфейсе металл-диэлектрик. Из анализа следует, что создаваемый градиентом температуры поток магнонов, в зависимости от его направления, приводит к передаче углового момента от магнотонной подсистемы в спиновую подсистему электронов и наоборот. Эффективность передачи энергии между подсистемами определяется температурами соответствующих подсистем. Отличный от нуля вклад в спин-волновой ток реализуется, если температуры соответствующих подсистем различны.

[1] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harri, et. al., Nature, V.445, 778 (2008).

[2] K. Uchida, J. Xiao, H. Adachi, et. al., Natur. Mater. 9, 894 (2010).

[3] R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima, J. Phys. Soc. Japan, V.12, 1203 (1957); J.M. Luttinger, Phys.Rev. V.135, (1964); L. Osager, Phys.Rev. V.37, 405 (1931).

[4] Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика Москва, Физматлит, 1971.

ЭПР исследование магнетика типа «спиновая лестница» с однородным взаимодействием Дзялошинского-Мория

В.Н. Глазков^{1,2}, Ю.В. Красникова^{1,2}, М.А. Файзуллин³, Г.М. Скоблин^{1,2}, D. Schmidiger⁴,
A. Zheludev⁴

¹Институт физических проблем им. П.Л.Капицы РАН, 119334 Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

³Институт физики Казанского федерального университета, 420008 Казань, Россия

⁴Neutron Scattering and Magnetism, Laboratory for Solid State Physics, ETH Zürich, 8006 Zürich, Switzerland

e-mail: glazkov@kapitza.ras.ru

Магнитные системы с пониженной пространственной размерностью активно изучаются в последнее время. В этих системах из-за квантовых эффектов оказываются невозможными традиционные формы магнитного упорядочения, и при низких температурах реализуется сильно коррелированное (но неупорядоченное) состояние спиновой жидкости. Особый интерес представляют системы, в энергетическом спектре которых есть щель, отделяющая неупорядоченное основное состояние от магнитных возбуждений. В таких спин-щелевых системах спин-жидкостное состояние оказывается устойчиво к слабым возмущениям, связанным с взаимодействием низкоразмерных подсистем, влиянием внешнего магнитного поля или неизбежными в реальных кристаллах анизотропными взаимодействиями. Это позволяет получать объекты для экспериментального изучения свойств спин-жидкостного состояния. При этом интерес представляет как поиск систем возможно более близких к изотропной гейзенберговской модели, так и анализ влияния различных анизотропных взаимодействий на свойства спин-жидкостного состояния.

Структура обменных связей магнетика типа «спиновая лестница» представляет пару однородных спиновых цепочек, связанных друг с другом. Для случая антиферромагнитного взаимодействия при любом соотношении между обменными интегралами вдоль цепочек J_{\parallel} и между цепочками J_{\perp} спектр возбуждений оказывается щелевым. Соединение $(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{CuBr}_4$ (сокращённо DIMPY) является примером магнетика типа «спиновая лестница». Исследование различными статическими методами и методами нейтронного рассеяния [1,2] показало, что роль анизотропных взаимодействий в этом соединении очень мала и его свойства хорошо описываются учётом только гейзенберговского взаимодействия. Измерение спектра возбуждений [2] позволило определить константы обменного взаимодействия $J_{\parallel}=1.42$ мэВ и $J_{\perp}=0.82$ мэВ и щель в спектре $\Delta=0.32$ мэВ.

Низкая (моноклинная) симметрия кристалла DIMPY приводит к тому, что в нём имеется два типа эквивалентных «спиновых лестниц», отличающихся ориентацией относительно кристаллографических осей. Наличие центра инверсии между цепочками и отсутствие центра инверсии в цепочке разрешает наличие в цепочках однородного вдоль цепочки взаимодействия Дзялошинского-Мория $H_{\text{DM}}=\mathbf{D}\sum\mathbf{S}_i\times\mathbf{S}_{i+1}$, причём направления вектора Дзялошинского-Мория на двух цепочках одной лестничной структуры оказываются противоположными. Известно, что однородное взаимодействие Дзялошинского-Мория в одномерных системах может приводить к нетривиальным изменениям спектра [3], что делает интересным поиск эффектов, связанных с такими взаимодействиями в DIMPY. Мы изучили изменение спектров электронного парамагнитного резонанса от комнатной температуры до 450 мК при различных ориентациях магнитного поля относительно кристалла. Измерения проводились в

полях до 10Тл на частотах от 25 до 80 ГГц. При обозначении ориентации поля принята кристаллографическая система координат с $x||a$, $y||b$.

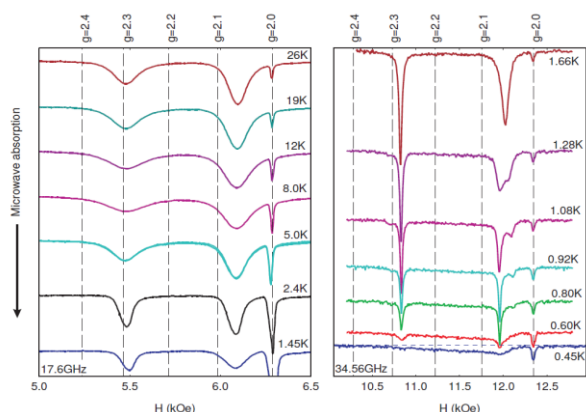


Рис.1 Изменение спектра ЭПР поглощения с температурой. Узкая линия с $g=2$ маркер ДФПГ. $\mathbf{H}||(\mathbf{x}+\mathbf{y})$

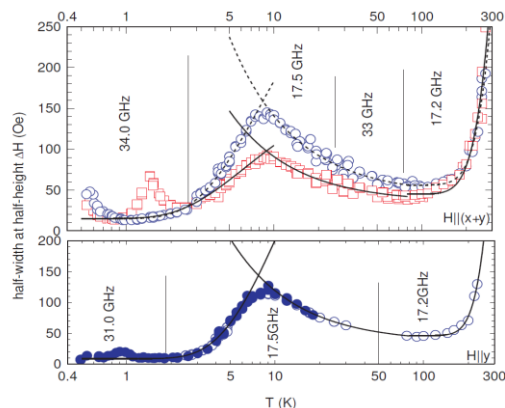


Рис.2 Изменение ширины линии с температурой. Символы: эксперимент, кривые: эмпирические подгонки.

В ориентациях поля, в которых две лестничные структуры, имеющиеся в кристалле, оказывались неэквивалентны относительно поля, в спектре резонансного поглощения разрешались две компоненты (рис.1). Угловая зависимость g -фактора этих компонент может быть описана в модели одноосного g -тензора с главными значениями 2.30 и 2.04. Компоненты наиболее хорошо разрешены при $\mathbf{H}||(\mathbf{x}+\mathbf{y})$. При низких температурах интенсивность сигнала ЭПР исчезает, что связано с наличием щели в спектре магнитных возбуждений. При этом при температурах около 1К наблюдалось расщепление спектральных компонент с появлением субкомпоненты малой интенсивности, отщеплённой на 100-150 Э от основного сигнала. Это расщепление связывается нами со снятием вырождения триплетного возбуждённого уровня под действием анизотропных взаимодействий.

Измеренная при азотной температуре угловая зависимость ширины линии ЭПР была описана в модели, учитывающей наличие однородного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Экспериментальные данные могут быть описаны величиной этого взаимодействия около 0.2К. Оценка расщепления триплетного уровня под действием такого взаимодействия, сделанная в рамках теории возмущений, предсказывает отщепление субкомпонент от основного сигнала величиной около 40 Э, что близко к наблюдаемому значению.

Температурная зависимость ширины линии демонстрирует несколько кроссоверов между различными режимами спиновой релаксации (рис.2). Эмпирически температурная зависимость при $T > 100\text{K}$ описывается активационным законом с энергией активации 1200...1400К, связанным с ростом релаксации в решётку, в интервале от 10 до 70К законом $(1+\Theta/T)$ с характерной температурой около 20К, что связано с ростом антиферромагнитных корреляций при охлаждении, а при температурах ниже 10К активационным законом с энергией активации близкой к удвоенной щели, что говорит о вкладе парного взаимодействия возбуждений в спиновую релаксацию в этом режиме.

Работа поддержана РФФИ.

- [1] A. Shapiro и др. J. Am. Chem. Soc. **129**, 952 (2007).
- [2] D. Schmidiger и др. Physical Review B **84**, 144421 (2011); Physical Review Letters **108**, 167201 (2012).
- [3] K. Povarov и др. Physical Review Letters **107**, 037204 (2011).

Квантовая теория сильно анизотропных двух- и четырехподрешеточных одноцепочечных магнетиков

В.В. Вальков¹, М.С. Шустин²

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036, Академгородок 50/38, Красноярск, Россия

²Сибирский Федеральный Университет, 660041, проспект Свободный 79, Красноярск, Россия

e-mail: vvv@iph.krasn.ru, asv86@iph.krasn.ru

Прогресс в технологиях синтеза органических магнитных соединений привел к возможности экспериментального исследования низкоммерных магнитных структур [1], пример, одноцепочечные магнетики (single chain magnets – SCM). Большинство SCM характеризуются наличием долгоживущих возбужденных магнитных состояний типа упорядоченных магнитных доменов атомного масштаба. Реализация фотоиндуцированных переходов между такими состояниями, осуществленная в экспериментах по модификации магнитных свойств SCM при приложении оптического облучения [2,3], позволяет рассматривать такие магнетики в качестве перспективных материалов элементной базы устройств записи и хранения информации [4].

В данной работе методом диаграммной техники для операторов Хаббарда при учете квантовых эффектов развита теория сильно анизотропных магнетиков, содержащих несколько магнитных подрешеток. Это позволило корректно описать квантовые магнетики и воспроизвести наблюдаемые особенности низкотемпературных свойств SCM на основе железа: двухподрешеточного SCM $\{[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{Tp}^*)(\text{CN})_3]_2\text{Fe}^{\text{II}}(\text{bpmh})\} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и четырехподрешеточного SCM catena- $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{ClO}_4)_2\{\text{Fe}^{\text{III}}(\text{bpca})_2\}](\text{ClO}_4)$.

При исследовании низкотемпературных спектральных и термодинамических свойств отмеченных соединений проводился самосогласованный расчет магнетонного спектра и одноионных чисел заполнения. При этом выход за рамки приближения среднего поля позволил учесть сильно развитые спиновые флуктуации. Проведенный анализ низкотемпературной термодинамики позволил сформулировать эффективные модели изинговского типа, для которых использовался метод трансфер-матрицы. На основе такого подхода удалось описать экспериментально наблюдаемую модификацию температурной зависимости магнитной восприимчивости в четырехподрешеточном SCM catena- $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{ClO}_4)_2\{\text{Fe}^{\text{III}}(\text{bpca})_2\}](\text{ClO}_4)$ при приложении внешнего оптического облучения.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы Президиума РАН "Актуальные проблемы физики низких температур" и РФФИ (гранты № 13-02-00523, № 14-02-31237, № 15-42-04372).

[1] C. Coulon, H. Miyasaka, R. Clerac, *Struct. Bonding* **122**, 163 (2006).

[2] M. Yamashita, T. Kajiwara, et al., Presentation at 6th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors, and Ferromagnets, (2005).

[3] T. Liu, H. Zheng, S.Kang et. al., *Nat. Commun.* **4**, 2826 (2013).

[4] W.-X. Zhang, R. Ishikawa, B. Breedlove, M. Yamashita, *RSC Advances* **3**, 3772 (2013).

Низкочастотная спиновая динамика квазиодномерного антиферромагнетика с однородным взаимодействием Дзялошинского-Мории $K_2CuSO_4Br_2$

Т.А. Солдатов^{1,2}, К.Ю. Поваров³, М. Hälg,³ W.E.A. Lorenz³, А.И. Смирнов¹

¹Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный, Россия

³ETH Zürich, CH-8093, Zürich, Switzerland

e-mail: tim-sold@yandex.ru

Низкоразмерные антиферромагнетики демонстрируют отсутствие магнитного упорядочения в широкой области температур ниже температуры Кюри-Вейсса T_{CW} . В этой области спиновая система сильно коррелирована и находится в так называемой спин-жидкостной фазе, в которой существуют долгоживущие возбуждения. В квазиодномерном диэлектрическом антиферромагнетике $K_2CuSO_4Br_2$ $T_{CW} = 20$ К, а упорядочение задерживается до точки Нееля $T_N = 70$ мК. В этих кристаллах магнитные ионы меди Cu^{2+} , несущие спин $S = 1/2$, располагаются вдоль кристаллографической оси a , формируя спиновые цепочки. Внутрицепочечный обменный интеграл $J = 20.5$ К значительно больше межцепочечного $J' = 0.034$ К. Отличительной чертой кристаллов данного вещества является существование *однородного* взаимодействия Дзялошинского-Мории (ДМ) между соседними магнитными ионами внутри цепочки. Симметричный анализ кристаллической структуры $K_2CuSO_4Br_2$ показывает, что векторный параметр \mathbf{D} взаимодействия ДМ внутри каждой цепочки имеет одинаковое для всех пар спинов направление вдоль кристаллографической оси b , но антипараллелен в соседних цепочках [1]. Однородное взаимодействие ДМ между соседними спинами в гейзенберговской цепочке спинов $S = 1/2$ модифицирует двухспиновый континуум возбуждений, сдвигая весь спектр в \mathbf{q} -пространстве на волновой вектор $q_{DM} = \pi D/Ja$ [2]. Как следствие, в магнитном поле $\mathbf{H} \parallel \mathbf{D}$ линия электронного спинового резонанса (ЭСР) расщепляется на две линии с частотами на верхней и нижней границах несмещенного континуума при волновом векторе q_{DM} . При ориентации магнитного поля \mathbf{H} перпендикулярно вектору \mathbf{D} сигнал магнитного резонанса не должен расщепляться, но ожидается образование энергетической щели в нулевом поле. Спиновый дублет ЭСР и энергетическая щель были действительно экспериментально обнаружены в спин-жидкостной фазе квазидвумерного антиферромагнетика на искаженной треугольной решетке Cs_2CuCl_4 , в котором однородное взаимодействие ДМ существует в спиновых цепочках, связь между которыми ослаблена из-за фрустрации.

Цель представленной работы - исследовать магнитный резонанс в спин-жидкостной фазе $K_2CuSO_4Br_2$ в широкой области температур с целью обнаружения спинового дублета в антиферромагнетике с практически идеальной цепочечной структурой.

В области температур $T > 25$ К мы наблюдаем в кристаллическом образце $K_2CuSO_4Br_2$ одиночную линию парамагнитного резонанса. При охлаждении ниже 10 К спектр магнитного резонанса значительно изменяется: для $\mathbf{H} \parallel a$, $\mathbf{H} \parallel c$ резонансная линия сдвигается в сторону более низких полей, для $\mathbf{H} \parallel b$ - превращается в спиновый дублет, линии которого обозначены M1 и M2 на Рис.1. При низкой температуре видна также небольшая по интенсивности линия парамагнитных дефектов (P на Рис. 1) Трансформация резонансных линий прекращается при температуре около 1 К, что иллюстрируется зависимостью энергетической щели от магнитного поля на Рис. 3.

Теоретический анализ [2] спионного континуума для антиферромагнитной цепочки спинов $S = 1/2$ с однородным взаимодействием ДМ предсказывает следующие частоты спионного дублета для произвольного направления поля \mathbf{H} по отношению к ДМ

$$\text{вектору } \mathbf{D} [2] : F = \left| g\mu_B \vec{H} \pm \frac{\pi}{2} \vec{D} \right|.$$

Используя последнюю формулу, нами была получена оценка величины D : $D \approx 0.27$ К.

Таким образом, в кристаллах $\text{K}_2\text{CuSO}_4\text{Br}_2$ обнаруживается магнитный резонанс спионного типа, в полном соответствии с допустимой симметрией кристалла ориентацией векторного параметра взаимодействия Дзялошинского-Мории.

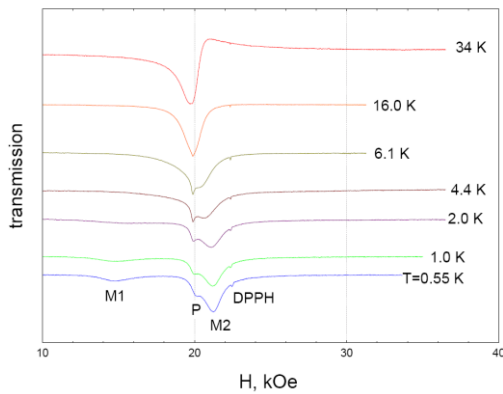


Рис. 1. Температурная эволюция линии ЭСР, $\mathbf{H} \parallel b$, $F = 62.92$ GHz.

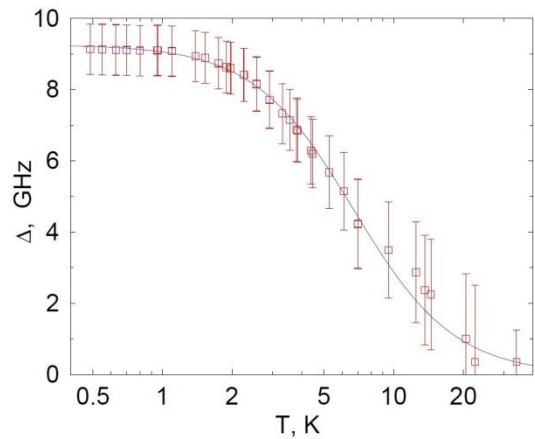


Рис. 2. Температурная зависимость щели.

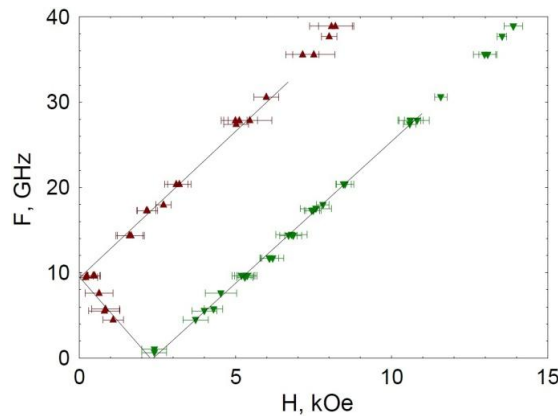


Рис. 3. Зависимость частот спионного дублета от магнитного поля, $\mathbf{H} \parallel b$, $T = 1.3$ К.

[1] M. Hälg, *et. al.*, Phys. Rev. B **90**, 174413 (2014).

[2] K.Yu. Povarov, *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 037204 (2011).

Magnon BEC in Antiferromagnets with Suhl-Nakamura Interaction

Yu.M. Bunkov^{1,2}, E.M. Alakshin², R.R. Gazizulin^{1,2}, L.I. Isaenko^{3,4}, A.V. Klochkov²,
T.R. Safin², K.R. Safiullin², M.S. Tagirov², S.A. Zhurkov³

¹Institut Neel and Univ. Grenoble Alpes, 38042, Grenoble, France

²Kazan Federal University, 420008, Kazan, Russia

³V.S. Sobolev Institute of geology and mineralogy, SB RAS, 630090, Novosibirsk, Russia

⁴Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia

e-mail: g-rasul@yandex.ru

The interest to antiferromagnets with Suhl-Nakamura interaction begins from 1960s when de Gennes *et al* [1] described interesting non-linear phenomena in these systems. The two conditions make these systems drastically different from the usual antiferromagnetic case. Namely, the concentration of nuclear ions is very high and the electron spin resonance frequency is very low. It leads to the coupling of the precession of nuclear and electron spins which can be interpreted in terms of the Suhl-Nakamura interaction – indirect nuclear-nuclear interaction through the ordered electron spins [2]. As a result, the dynamic frequency shift $\omega_p(\beta)$ occurs in the spectrum of nuclear spin waves (Fig. 1)

$$\omega_k^n(\beta) = \omega^{n0} - \frac{\omega_p(0) \cos \beta}{1 + (kr_0)^2}, \quad (1)$$

where $\omega^{n0} = 666$ MHz – non-shifted frequency of NMR in the hyperfine field of the electrons, H - external magnetic field, β – angle between magnetization and magnetic field, k – wave vector and $r_0 \sim 10^{-4}$ cm – radius of the Suhl-Nakamura interaction.

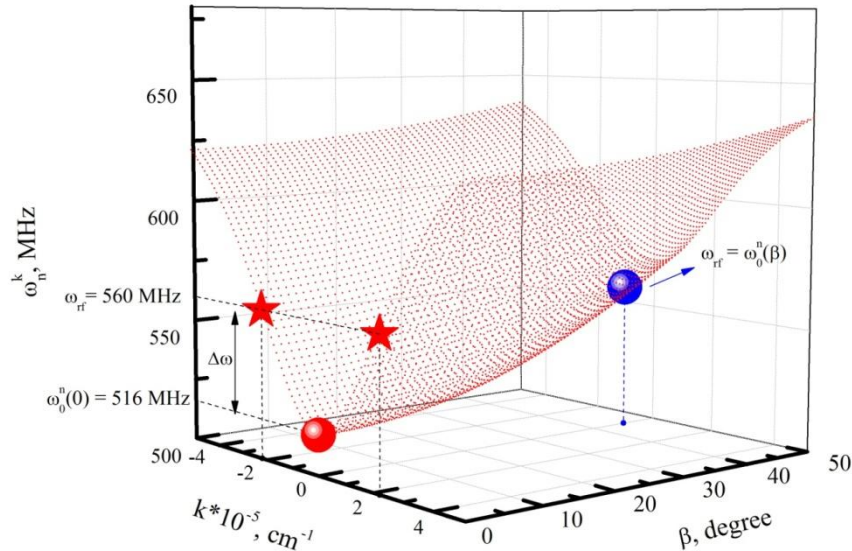


Figure 1 – Spectrum of nuclear spin waves for different non-equilibrium metastable states at the fixed external magnetic field. The red stars correspond to the rf excitation of spin waves with $k \neq 0$. Blue ball correspond to the non-equilibrium BEC state with $k=0$ for frequency difference $\Delta\omega = 34$ MHz.

It can be seen from Fig. 1 that the spectrum have metastable minima with $k = 0$ at non-equilibrium conditions, i.e. when the magnetization is deflected from the direction of external magnetic field on some angle β . Particularly, rf pulse pumped the non-equilibrium magnons to the system which then condensed to the metastable state with $k = 0$ [3], as shown in Fig. 1. Let us consider these in details. Suppose that the sample at the temperature of 1.5 K. Before applying the rf pumping there are not non-equilibrium magnons in the sample so that $\beta = 0$, $k = 0$ and $\omega_0^n(0) = 516$ MHz (given by external magnetic field). The system is in state

marked by red ball in Fig. 1 where non-equilibrium magnons do not exist. Now we apply rf pulse with frequency $\omega_{rf} = 560$ MHz that provides the frequency difference $\Delta\omega = 34$ MHz. During this non-resonant rf pulse non-equilibrium magnons with $k \neq 0$ are pumped to the system whose frequency $\omega_k^n(0)$ corresponds to the ω_{rf} . But the number of non-equilibrium magnons is increased, consequently the nuclear spin wave spectrum is modified as shown in Fig. 1. Finally, all non-equilibrium magnons are condensed to a minimum of energy in rotating frame with $k = 0$, where $\omega_0^n(\beta) = \omega_{rf}$ (blue ball in Fig. 1). The position of the minimum is determined by the initial frequency difference $\Delta\omega$ which also defines the final deflection angle β of coherently precessing magnetization. In Fig. 2 induction decay signals at different rf pumping conditions are shown.

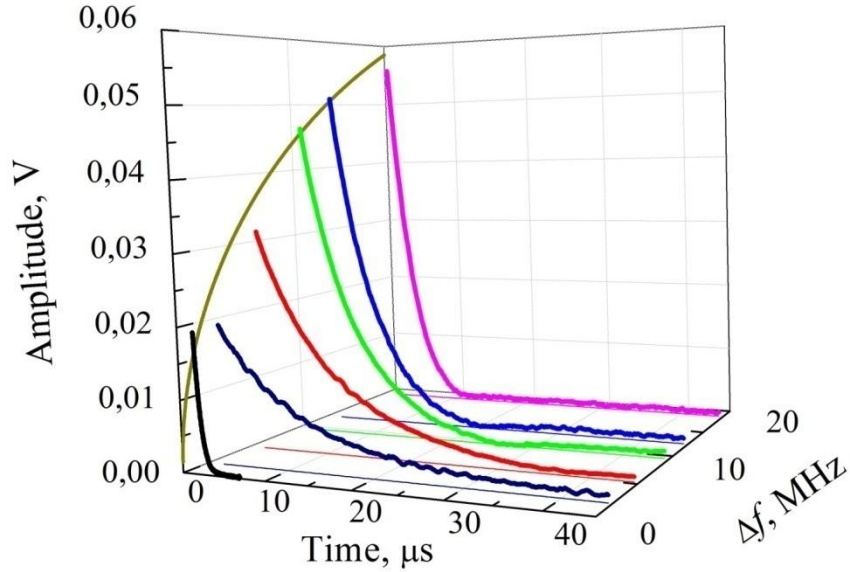


Figure 2 – FID signals at different rf pumping conditions. Dark yellow line is the theoretical value of the amplitude of BEC formation at different frequency shifts.

In Fig. 2 one can see short FID signal at linear conditions where $\Delta\omega = \omega_{rf} - \omega_0^n(0) \approx 0$. This signal is shown by black line. It has duration $T_2^* \approx 1 \mu\text{s}$ provided by magnetic field inhomogeneities. This time constant was obtained by exponential fitting of the decay amplitude. All other signals are obtained by switch-off technique. We applied to the resonator with the CsMnF_3 sample the 1 s pulse which frequency was higher than resonance frequency at the fixed external magnetic field providing the initial frequency difference $\Delta\omega = \omega_{rf} - \omega_0^n(0) > \delta\omega$. After switching off the rf pumping the FID signals were observed. We see that the lifetime of the FID signal dramatically grows by comparison with those at linear conditions. Particularly, the lifetime of FID at $\Delta\omega = 2.5$ MHz is about 10 μs that on order of magnitude longer than caused by magnetic field inhomogeneities. It can also be seen that the amplitude increases with frequency difference in full agreement with conditions of magnon BEC formation (dark yellow line).

- [1] P.G. de Gennes, P.A. Pinkus, F. Hartmann-Boutron, J.M. Winter, *Phys. Rev.*, **129**, 1105 (1963).
- [2] M.I. Kurkin, E.A. Turov, *NMR in Magnetically Ordered Materials and its Applications*, Nauka, Main Editorial Board for Physical and Mathematical Literature, Moscow (1990).
- [3] Yu.M. Bunkov, E.M. Alakshin, R.R. Gazizulin, A.V. Klochkov, V.V. Kuzmin, V.S. L'vov, M.S. Tagirov, *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 177002 (2012).

Static and Dynamic Magnetic Properties of Triangular Lattice Frustrated Orthosilicates A_2MnSiO_4 (A=Li, Na, Ag)

E.A. Zvereva¹, R.S. Denisov¹, V.B. Nalbandyan², I.L. Shukaev², C. Koo³,
A.N. Vasiliev¹, R. Klingeler³

¹Faculty of Physics, Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

²Chemistry Faculty, Southern Federal University, 7 ul. Zorge, Rostov-na-Donu, 344090 Russia

³Kirchhoff Institute for Physics, Heidelberg University, D-69120 Heidelberg, Germany

e-mail: zvereva@mig.phys.msu.ru

The static and dynamic magnetic properties of triangular lattice orthosilicates A_2MnSiO_4 (A=Li, Na, Ag) were investigated for the first time. Both lithium and sodium samples order antiferromagnetically with Neel temperatures ~ 10 K and ~ 4.5 K respectively, while silver sample did not show long-range magnetic order down to 2 K. At high temperatures, the magnetic susceptibility $\chi(T)$ nicely follows the Curie-Weiss law with the Weiss temperatures $\Theta \sim -35$ K, -27 K and -9 K for Li, Na and Ag samples, respectively, that indicates predominance of antiferromagnetic exchange interactions with appreciable frustration ($f=\Theta/T_N$) on manganese triangular network for all samples studied. Indeed, the dynamic magnetic studies (electron spin resonance) revealed the extended temperature range of strong short range correlations for all three samples with characteristic absorption line broadening upon approaching long-range order transition from above. This divergence of the linewidth was treated in the frame of Kawasaki-Mori-Huber theory. The effective magnetic moment was found to be about $5.8 \mu_B/f.u.$ that agrees with theoretical estimations using determined from ESR effective g-factors ~ 2 and assuming high-spin configuration of Mn^{2+} ($S=5/2$). Applied magnetic field shifts T_N to low- T side for Li and Na samples. At the same time their magnetization curves demonstrate an upward curvature suggesting the presence of magnetic field induced spin-flop transition at $B_{SF} \sim 2.2$ T and 1.5 T for Li and Na samples, respectively. Based on the thermodynamic data in applied magnetic fields we suggest the magnetic phase diagrams (Fig. 1) in agreement with our experimental findings.

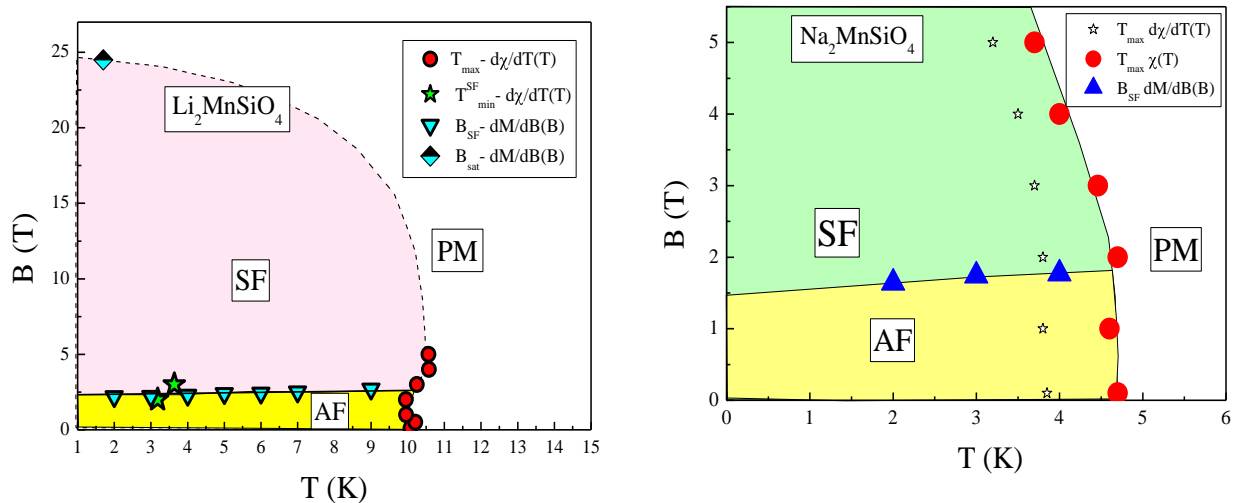


Fig. 1. Magnetic phase diagrams for triangular lattice antiferromagnets A_2MnSiO_4 (A=Li, Na)

Jahn-Teller Effect and Relaxation in SrF₂:Cr²⁺ Crystals

N.S. Averkiev¹, I.B. Bersuker², V.V. Gudkov^{3,4}, S. Zherlitsyn⁵, S. Yasin⁵,
I.V. Zhevstovskikh^{3,6}, K.A. Baryshnikov¹, A.M. Monakhov¹, M.N. Sarychev³,
G.S. Shakurov⁷, V.A. Ulanov⁷, V.T. Surikov⁸

¹A.F. Ioffe Physical Technical Institute of the RAS, 194021, 26, Polytekhnicheskaya st., St-Petersburg, Russia

²Institute for Theoretical Chemistry, The University of Texas at Austin, TX 78712, USA

³Ural Federal University, 620002, 19, Mira st., Ekaterinburg, Russia

⁴Russian State Vocational University, 620012, 11, Mashinostroitelei st., Ekaterinburg, Russia

⁵Hochfeld-Magnetlabor Dresden (HLD), Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, D-01314 Dresden, Germany

⁶M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the RAS, 620137, 18, Kovalevskaya st., Ekaterinburg, Russia

⁷Kazan Physical Technical Institute of the RAS, 420029, 10/7, Sibirsky trakt, Kazan, Russia

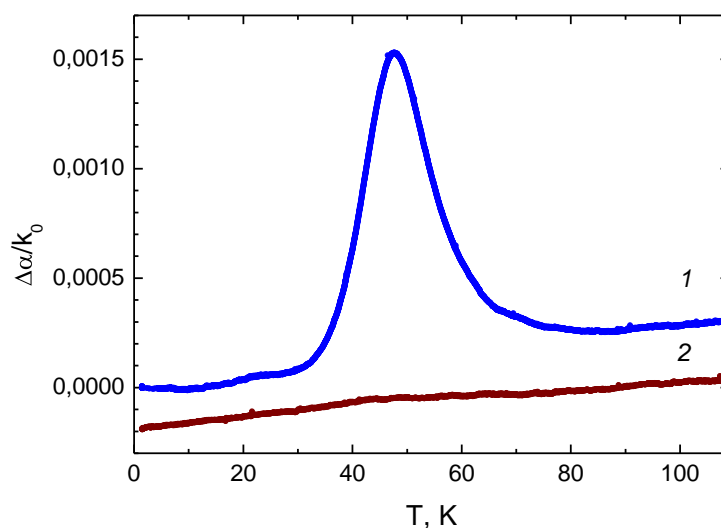
⁸Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the RAS, 620990, 91, Pervomaiskaya st., Ekaterinburg, Russia

e-mail: gudkov@imp.uran.ru

Ultrasonic investigation of impurity centers in crystals were shown to be instrumental in revealing their specific properties, in particular, the parameters of the dynamic Jahn-Teller effect (JTE), including the symmetry of local distortions, vibronic coupling constants, potential energy barriers, and relaxation mechanisms [1,2]. We explored SrF₂ crystals doped with chromium ions by means of ultrasound of $\omega/2\pi=105$ MHz frequency propagating along the $\langle 110 \rangle$ crystallographic axis in the temperature interval $T=1.4-110$ K. Both shear normal modes, polarized along the $\langle 110 \rangle$ axis (fast mode) and along the $\langle 100 \rangle$ axis (slow mode), were investigated. The velocities of the fast and slow modes are determined by the elastic moduli $(C_{11}-C_{12})/2$ and C_{44} , respectively. JT centers of Cr²⁺ ions in fluorite crystals CdF₂, CaF₂, SrF₂ were studied earlier by electron spin resonance [3], and in CdF₂ by optical experiments [4], and it was found that the distorted JT complex Cr_{Sr}F₈ has orthorhombic symmetry. In our experiments the SrF₂:Cr crystal was grown by Chokhralsky's method in graphite crucible. Chromium impurities were introduced via the CrF₃ powder. The concentration of 3d elements has been measured by an ELAN 9000 ICP-MS quadrupole-based instrument (Perkin-Elmer SCIEX).

Fig.1. Temperature dependence of the relative ultrasonic attenuation ($\Delta\alpha/k_0$) for the slow (1) and fast (2) modes. $k_0=\omega/v$ is the wave number, v is phase velocity of the corresponding mode. $\Delta\alpha=\alpha(T)-\alpha(1.4\text{ K})$. The position of the curve 2 is shifted for clarity.

The concentration of ⁵²Cr proved to be of $n=1.6\times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$, and of much lower magnitudes for the other impurities. The temperature dependences of the



ultrasonic attenuation are shown in Figure 1; there is a peak of the curve related to the slow mode and a very small variation in the fast mode. The curve 1 is typical for relaxational attenuation α_r caused by the JT centers in impurity crystals (see [1, 2] and references therein). It is described by the expression

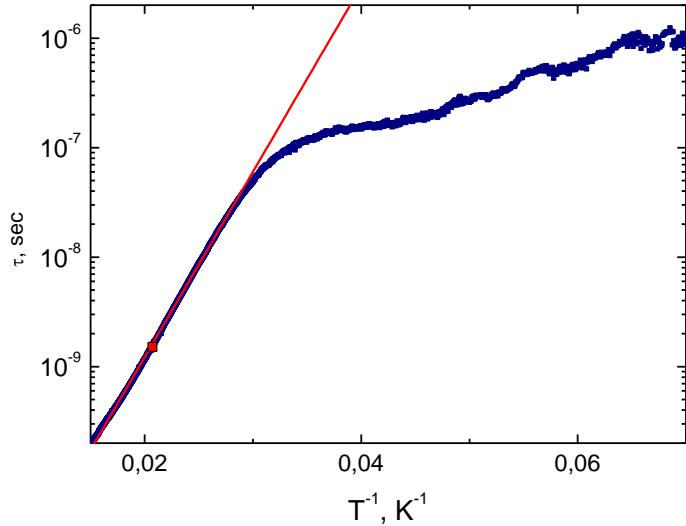
$$\alpha_r = \frac{1}{2} k_0 \frac{n a_0^2 F_i^2}{C_0 \kappa T} \frac{\omega \tau}{1 + \omega \tau^2}, \quad (1)$$

where κ is the Boltzmann constant, a_0 is the Cr-F distance, F_i is the linear vibronic coupling constant related to the JT displacements (in our case $i=E$ or T_2 , respectively), τ is the relaxation time. Relaxational attenuation is the result of subtraction of monotonic background attenuation α_b from the measured one $\alpha(T)$: $\alpha_r = \alpha(T) - \alpha_b$. Equation (1) makes it possible to construct expressions for τ and F_1 (see e.g., [1]):

$$\tau(T) = \frac{1}{\omega} \left[\frac{\alpha_r(T_1) T_1}{\alpha_r(T) T} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha_r(T_1) T_1}{\alpha_r(T) T} \right)^2 - 1} \right], \quad F_i = \sqrt{\frac{4 C_0 \kappa T_1 \alpha_r(T_1)}{k_0 a_0^2 n}}, \quad (2)$$

where T_1 is the temperature that satisfies the condition $\omega \tau(T_1) = 1$. Relaxation in the JT system may be of two main mechanisms: tunneling through the potential energy barrier and thermal activation. The latter is described in our case by the relaxation time $\tau_T = (3\nu_0)^{-1} \exp(E_a/\kappa T)$, where E_a is the activation energy (for strong vibronic coupling it is approximately the potential energy barrier), ν_0 is the high temperature over-the-barrier rotational frequency. Our study revealed the trigonal distortions with $F_T = 4.2 \times 10^{-5}$ dyn, and the smaller tetragonal ones with $F_T = 0.7 \times 10^{-5}$ dyn. Temperature dependence of relaxation time shown in Fig.2 yields the magnitude of activation energy: $E_a = 34$ meV.

Fig.2. Temperature dependence of the relaxation time. The line shows the fitting of τ_T which describes the thermal activation mechanism.



Support by RFBR grant № 15-02-02750-a is acknowledged.

- [1] V.V. Gudkov, I.B. Bersuker. In *Vibronic Interactions and the Jahn-Teller Effect. Theory and Applications*. Eds: M. Atanasov, C. Daul, Ph.L.W. Tregenna-Piggot. Springer, Dordrecht, Heidelberg, London, New York, p.143-162, 2012.
- [2] N.S. Averkiev, I.B. Bersuker, V.V. Gudkov *et al.* J. Applied Physics, **116**, 103708 (2014).
- [3] M.M. Zaripov, V.F. Tarasov, V.A. Ulanov, *et al.* Fizika Tverdogo Tela, **37**, 806 (1995); **44** 1958 (2002).
- [4] W. Ulrici, Phys. Stat. Sol. (b) **84**, K155 (1997).

Кристаллическое поле и спин-фононные взаимодействия в холдейновских магнетиках $R_2\text{BaNiO}_5$: спектроскопическое исследование

Климин С.А.

ФГБУН Институт спектроскопии Российской Академии Наук, 142190, ул. Физическая, 5, г. Москва, г. Троицк

e-mail: klimin@isan.troitsk.ru

Y_2BaNiO_5 – самое известное модельное соединение для изучения холдейновского магнетизма, в котором не наблюдается магнитного упорядочения, по крайней мере до температуры 100 мК. В родственных соединениях $R_2\text{BaNiO}_5$ присутствие магнитного иона R^{3+} приводит к магнитному упорядочению при низких температурах ($T_N \sim 12\text{-}60$ К в зависимости от редкой земли R). Интерес к семейству соединений $R_2\text{BaNiO}_5$ подогревается парадоксальным сосуществованием трехмерного магнитного порядка и холдейновской щели. В данной работе мы рассмотрим эффекты кристаллического поля [1,2] и его влияние на магнитные свойства цепочечных никелатов, первое экспериментальное наблюдение связанной фонон-магнитной моды для холдейновских систем в монокристалле $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$, квантово-критичное поведение магнитной системы в зависимости от «магнитной разбавленности» x в серии соединений $(\text{Nd}_x\text{Y}_{1-x})_2\text{BaNiO}_5$.

- [1] M.N. Popova, S.A. Klimin, E.P. Chukalina, et.al., Phys. Rev B **68**, 115103 (2003).
- [2] M.N. Popova, S.A. Klimin, E.P. Chukalina, et.al., Phys. Rev. B, **71**, 024414 (2005).
- [3] S.A. Klimin, A.B. Kuzmenko, M.N. Popova, et.al., Phys. Rev. B **82**, 174425 (2010).

Влияние фокусировки фононов на теплопроводность кремниевых пленок

И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, И.Г. Кулеев, В.В. Устинов

Институт физики металлов УрО РАН, 620990, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, Россия

e-mail: kuleev@imp.uran.ru

В связи с развитием технологии наноструктурированных материалов в последние годы значительно возрос интерес к исследованию их теплопроводящих свойств [1-3]. Известно [4], что анизотропия упругих свойств кубических кристаллов приводит к фокусировке фононов, т. е. к возникновению направлений, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды. Экспериментальные исследования [5] показали, что фокусировка фононов приводит к анизотропии теплопроводности кристаллов Si и CaF₂, которая при низких температурах достигает 50%. Для анализа теплопроводности объемных материалов и наноструктур с учетом фокусировки фононов необходимо, прежде всего, аналитически решить проблему диффузного рассеяния фононов на границах образцов конечной длины и определить времена релаксации. Такая задача рассмотрена в работах [6]. В них дано полное аналитическое решение этой проблемы с учетом фокусировки фононов для образцов конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями и определены времена релаксации.

Нами проанализированы температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок различной толщины, измеренные в работах [3] в интервале температур от 17 до 350 К. К сожалению, в этих работах не указывались направления теплового потока $[L]$ и ориентации плоскостей пленок $\{J\}$ относительно кристаллографических осей. Поэтому в [7] мы рассчитали температурные зависимости теплопроводности для трех ориентаций $\{J\} = \{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ и согласовали результаты расчета с данными [3], воспользовавшись параметром зеркальности P в качестве подгоночного параметра. Использование трехмодовой модели Каллавея [8] и вычисленных нами в [6] времен релаксации фононов на границах позволило адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности пленок в интервале температур от 17 до 350 К. Как видно из рисунка 1а, для ориентации $\{J\} = \{100\}$ результаты расчета удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [3] при $P = 0.48, 0.29, 0.29, 0.14$ и 0.0 для пленок с толщинами соответственно 1.6, 0.83, 0.42, 0.1 и 0.02 мкм. В этом случае отношения значения теплопроводности для пленок с различными ориентациями плоскостей и толщинами $D = 1.6$ и 0.42 мкм при $P = 0.48, 0.29$ и температуре $T = 20$ К составляют $\kappa_{[100]}^{\{100\}} : \kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[100]}^{\{111\}} = 1.21 : 1.13 : 1$ и $1.62 : 1.36 : 1$, соответственно. Уменьшение толщины пленки приводит к возрастанию роли граничного рассеяния и, соответственно, к увеличению анизотропии теплопроводности. Отношения значений теплопроводности в пленках с $D = 0.1$ мкм при температуре $T = 20$ К для различных ориентаций плоскости пленки составляют $\kappa_{[100]}^{\{100\}} : \kappa_{[100]}^{\{110\}} : \kappa_{[100]}^{\{111\}} = 2.17 : 1.53 : 1$. Из полученных результатов следует, что при диффузном рассеянии фононов на границах кремниевых пленок наименьшей рассеивающей способностью (и максимальной теплопроводностью) обладает плоскость с ориентацией $\{100\}$, а максимальной рассеивающей способностью (и минимальной теплопроводностью) – плоскость с ориентацией $\{111\}$.

На рисунке 1б приведены температурные зависимости теплопроводности для пленок в режиме граничного рассеяния фононов (кривые 2 - 6) и в режиме

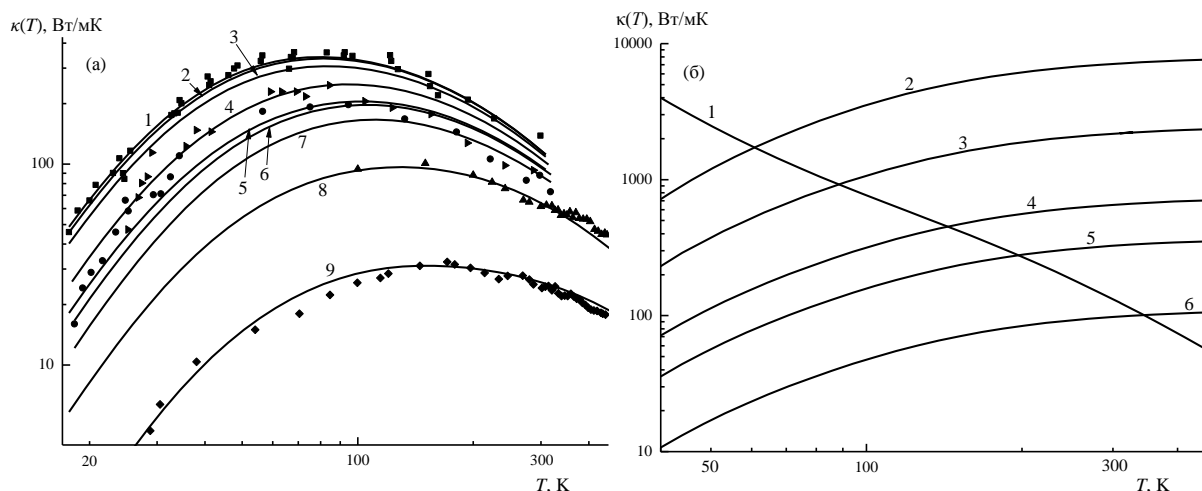


Рисунок 1. (а) Температурные зависимости теплопроводности кремниевых пленок для различных толщин D , параметров зеркальности P и длин пленок L : кривые 1,2,3 - $D = 1.6$ мкм, $P = 0.48$, $L = 8$ мкм; кривая 4 - $D = 0.83$ мкм, $P = 0.29$, $L = 8$ мкм; кривые 5,6,7 - $D = 0.42$ мкм, $P = 0.29$, $L = 8$ мкм; кривая 8 - $D = 0.10$ мкм, $P = 0.14$, $L = 100D$ и кривая 9 - $D = 0.02$ мкм, $P = 0$, $L = 100D$; для ориентаций плоскости пленки: кривые 1,4,5,8,9 – ориентация $\{100\}$, кривые 2,6 - ориентация $\{110\}$, кривые 3,7 - ориентация $\{111\}$. Символы \blacksquare ($D = 1.6$ мкм), \blacktriangleright ($D = 0.83$ мкм), \bullet ($D = 0.42$ мкм), \blacktriangle ($D = 0.10$ мкм), \blacklozenge ($D = 0.02$ мкм) – экспериментальные данные [3,4]. (б) Температурные зависимости теплопроводности для пленок с ориентацией $\{100\}$ для объемных механизмов релаксации - кривая 1, и для граничного рассеяния в пленках с параметрами: $D = 1.6$ мкм, $L = 8$ мкм и $P = 0.48$ - кривая 2; $D = 0.42$ мкм, $L = 8$ мкм и $P = 0.29$ - кривая 3; $D = 0.10$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ - кривая 4, $D = 0.05$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0.14$ - кривая 5 и $D = 0.02$ мкм, $L = 100D$ и $P = 0$ - кривая 6.

объемных механизмов релаксации фононов (кривая 1). Пересечение этих кривых дает температуры перехода от граничного рассеяния к объемным механизмам релаксации T_{BV} . При этой температуре граничное рассеяние обеспечивает 50% полного теплосопротивления. Численный анализ показал, что для кремниевых пленок с $D = 1.6$ и 0.42 мкм температуры перехода T_{BV} составляют соответственно 61 и 89 К. Уменьшение толщины пленки приводит к увеличению роли граничного рассеяния и к достаточно быстрому возрастанию T_{BV} . Так, например, для пленок с $D = 0.1$, 0.05 и $D = 0.02$ мкм имеем соответственно $T_{BV} = 143$, 196 и 345 К. При комнатной температуре вклады граничного рассеяния для пленок с $D = 1.6$, 0.42 , 0.1 , 0.05 и 0.02 мкм составляют соответственно 2, 6, 17, 29 и 58%. Итак, при комнатных температурах граничное рассеяние фононов играет значительную роль в теплопроводности достаточно тонких пленок.

Работа выполнена по плану РАН в рамках темы «Спин» при поддержке гранта ведущей научной школы НШ-14.120.14.1540.

- [1] D.G. Cahill, et al, J. Appl. Phys. **93**, 793 (2003).
- [2] D.G. Cahill, P.V. Braun, et al, J. Appl. Phys. Rev. **1**, 011305 (2014).
- [3] M. Asheghi, et al, Appl. Phys. Lett. **71**, 1798 (1997); M. Asheghi, et al, J. Heat Transfer **120**, 30-36, (1998); W. Liu and M. Asheghi, Appl. Phys. Lett. **84**, 3819 (2004);
- [4] J.P. Wolfe, Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids, Cambridge University Press, New York, 1998, p.411.
- [5] A.K. McCurdy, H.J. Maris, and C. Elbaum, Phys. Rev. B **2**, 4077 (1970).
- [6] И.И. Кулеев, И.Г. Кулеев, С.М. Бахарев, А.В. Инюшкин, ФТТ **55**, 24 (2013); I.I. Kuleyev, I.G. Kuleyev, S.M. Bakharev, A.V. Inyushkin, Physica B **416**, 81 (2013).
- [7] И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, И.Г. Кулеев, В.В. Устинов, ЖЭТФ **147** (2015) (в печати).
- [8] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев, С.М. Бахарев, ЖЭТФ, **145**, 292, (2014).

Магнитные возбуждения и магнон-фононное взаимодействие в CuWO_4 Р.В. Писарев¹, М.А. Просников¹, В.Ю. Давыдов¹, А.Н. Смирнов¹, К.А. Саблина²¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Россия²Институт физики им. Л.В. Киренского СОРАН, 660636, Красноярск, Россияemail: yotungh@gmail.com

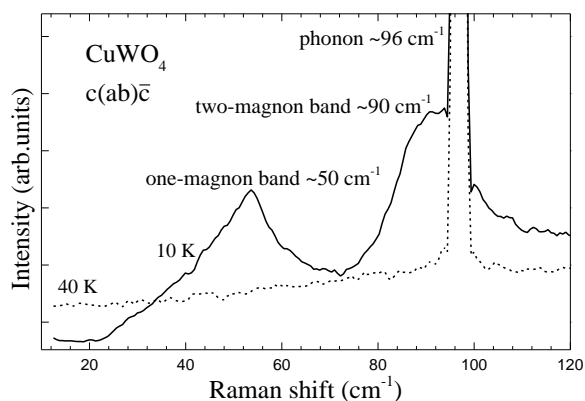
Вольфрамат меди CuWO_4 является низкосимметричным кристаллом триклинной сингонии, пространственная группа P-1 (#2, Z=2). Параметры элементарной ячейки $a=4.70 \text{ \AA}$, $b=5.84 \text{ \AA}$, $c=4.88 \text{ \AA}$ [1]. Кристаллическая структура CuWO_4 представляет собой смежные зигзагообразные цепочки октаэдров CuO_6 и WO_6 с общим ребром, расположенные вдоль оси c . Структура искажена статическим эффектом Яна-Теллера первого и второго порядка для групп CuO_6 и WO_6 , в присутствии $3d^9$ иона Cu^{2+} , что и обуславливает понижение симметрии кристалла в сравнении с другими вольфраматами моноклинной сингонии. Ячейка содержит два магнитных иона Cu^{2+} ($S=1/2$). При температурах ниже $T_N=24 \text{ K}$ происходит магнитное упорядочение с удвоением ячейки вдоль оси a , при котором моменты ионов Cu^{2+} величиной $0.67 \mu_B$ располагаются вдоль удлинённых осей октаэдров. Упорядочение ферромагнитно в цепочках и антиферромагнитно между ними [2]. На температурной зависимости магнитной восприимчивости наблюдается широкий максимум вблизи 90 K [2], что свидетельствует о наличии короткодействующего упорядочения в цепочках выше T_N .

Для исследования магнитных (магноны) и решеточных (фононы) возбуждений использовался метод комбинационного рассеяния света в спектральном диапазоне 15-1100 cm^{-1} при температурах 10-300 K. Были изучены поляризованные спектры рассеяния для всех основных геометрий. Ниже температуры Нееля наблюдалась широкая полоса с максимумом вблизи 50 cm^{-1} (см. Рис.), которая при увеличении

температуры уширялась и сдвигалась в область низких частот. При T_N полоса переходила в крыло квазиупругого рассеяния. Такое поведение этой полосы ниже T_N позволяет отнести ее к одномагнонному рассеянию, а крыло квазиупругого рассеяния выше T_N следует связать с ближним магнитным порядком. Совершенно другое поведение наблюдалось для широкой асимметричной полосы рассеяния с максимумом вблизи 90 cm^{-1} (см. Рис.). При повышении

температуры эта полоса практически не смещалась, но уширялась и уменьшалась в интенсивности, при этом сохраняясь вплоть до температур $5T_N$. Такое поведение позволяет связывать ее с двухмагнонным рассеянием света. В области частичного перекрытия этой полосы с фононами наблюдались яркие аномалии, свидетельствующие об эффективном магнон-фононном взаимодействии.

Работа поддерживается грантом правительства Российской Федерации №14.B25.0031.25 и грантом РФФИ 15-02-04222а.

[1] L. Kihlborg, E. Gebert, Acta Cryst. **26**, 1020-1026 (1970).[2] J.B. Forsyth, C. Wilkinson, A.I. Zvyagin, J. Phys. Condens. Matter **3**, 8433-8440 (1991).

**Вклад никелевой подсистемы в магнитные свойства
квазиодномерных магнетиков $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$**

Попова Е.А.¹, Климин С.А.², Попова М.Н.², Васильев А.Н.³

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» 101000, ул. Мясницкая, Москва, Россия

²Институт спектроскопии РАН, 142190, ул. Физическая 5, Троицк, Москва, Россия

³Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119992, Москва, Россия

e-mail: earopova@yahoo.com

Интерес к изоструктурным соединениям R_2BaNiO_5 (R - редкоземельный ион или ион иттрия) обусловлен одномерным характером их магнитных свойств. В кристаллической структуре R_2BaNiO_5 слегка сплюснутые октаэдры NiO_6 , соединяясь друг с другом через апикальный кислород, формируют цепочки спинов $S(Ni^{2+}) = 1$, направленные вдоль кристаллографической оси a . Взаимодействие ионов R^{3+} с ионами Ni^{2+} осуществляется через базальные ионы кислорода октаэдров NiO_6 . В Y_2BaNiO_5 магнитного упорядочения не происходит, по крайней мере, вплоть до 0.1К, и в спектре магнитных возбуждений наблюдается энергетическая щель ~ 10 meV [1]. Полная или частичная замена иона Y^{3+} на магнитный ион Nd^{3+} ($J=9/2$) приводит к антиферромагнитному упорядочению в $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$ с $x = 1, 0.75, 0.50, 0.25$. Однако, как показали нейтронографические исследования этих соединений [2], щель в спектре магнитных возбуждений Ni цепочки остается даже в упорядоченном состоянии. В настоящей работе для выявления особенностей поведения никелевой подсистемы проведены исследования температурных зависимостей магнитной восприимчивости $\chi(T)$ и спектров пропускания для соединений семейства $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$ в широком диапазоне концентраций, от $x = 0.01$ до $x = 1$.

Поликристаллические образцы были получены методом твердофазного синтеза, качество и состав образцов протестированы рентгеновскими методами. Температурные зависимости намагниченности в магнитном поле 0.01 Тв режимах ZFC и FC были получены в температурном диапазоне 1.8 – 300 К на магнетометре MPMS-XL5 SQUID.

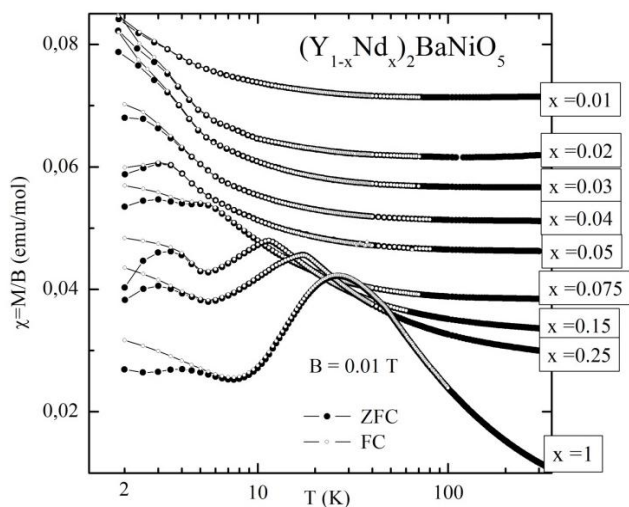


Рис.1. Температурные зависимости магнитной восприимчивости $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$, измеренные в режимах ZFC и FC. Кривые сдвинуты относительно друг друга.

Спектры пропускания в области оптических переходов в ионе Nd^{3+} были измерены на фурье-спектрометре высокого разрешения BRUKERIFS125HR.

Температурные зависимости магнитной восприимчивости представлены на Рис.1. Величина эффективного магнитного момента $\mu_{eff} = 5.06 \mu_B$, оцененная из экспериментальных данных для Nd_2BaNiO_5 , близка к значению $5.12 \mu_B$, рассчитанному для свободного иона Nd^{3+} в данном соединении. С уменьшением концентрации до $x = 0.15$ значение μ_{eff} зависит от выбранного интервала температур. При дальнейшем уменьшении x

магнитная восприимчивость становится температурно-независимой, и при малых концентрациях ($x=0.01, 0.02$) возрастает с ростом температуры. Все эти особенности указывают на то, что в высокотемпературной области никелевая подсистема во всех изученных соединениях ведет себя как в халдейновской системе Y_2BaNiO_5 . После вычитания магнитной восприимчивости, взятой из работы [3] для Y_2BaNiO_5 , полученные значения μ_{eff} совпадают со значениями, рассчитанными для свободного иона Nd^{3+} в каждом исследованном соединении.

При уменьшении температуры на зависимости $\chi(T)$ наблюдается широкий максимум (аномалия Шоттки), обусловленный перераспределением электронов при изменении температуры на подуровнях основного крамерсовского дублета иона Nd^{3+} , расщепленного внутренним магнитным полем, возникающим при упорядочении. Максимум смещается в сторону более низких температур при уменьшении концентрации неодима, что связано с уменьшением внутреннего поля, действующего на ион Nd^{3+} . На основе спектроскопических данных, для каждого соединения были получены температурные зависимости величины расщепления $\Delta(T)$ основного крамерсовского дублета иона Nd^{3+} и поля, действующего на неодим. Спектральные линии, соответствующие четырем переходам между двумя расщепленными крамерсовыми дублетами, легко разделяются для Nd_2BaNiO_5 . Наличие неэквивалентных центров неодима в соединениях с $x < 1$ приводит к заметному уширению спектральных линий, и расщепившиеся линии не разрешаются. Зависимости $\Delta(T)$, полученные по положению центра масс, были использованы для оценки вклада неодимовой подсистемы в магнитную восприимчивость всех соединений.

Вклад неодимовой подсистемы хорошо описывает аномалию Шоттки, но не описывает аномалию, наблюдающуюся при $T \sim 3K$ в ряде соединений. Величина и положение этой аномалии слабо зависят от концентрации x , но для соединений с $x < 0.04$, эта аномалия практически не видна на фоне роста магнитной восприимчивости неодима при уменьшении температуры до 2 K. Подобные аномалии наблюдались при замене Ni^{2+} на немагнитную примесь Zn^{2+} или Mg^{2+} в Y_2BaNiO_5 . Неконтролируемые немагнитные примеси могут приводить к разрывам цепочек, на концах которых возникают нескомпенсированные спины $S=1/2$ [4]. Взаимодействие спинов ведет к расщеплению четырехкратно вырожденного основного состояния сегмента цепочки на синглет и триплет, который, в свою очередь, расщепляется вследствие анизотропии иона Ni^{2+} ($\sim 2.5K$) и под действием внутреннего магнитного поля, действующего со стороны неодимовой подсистемы. Намагничивание сегментов цепочки приводит к аномалии на зависимости $\chi(T)$ при $T \sim 3K$. Небольшая нестехиометрия по кислороду в $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$ может привести, так же, как в Ca-допированном Y_2BaNiO_5 , к образованию дырки на O $2p$ орбитали вдоль цепочки никеля. Конкуренция антиферро- и ферромагнитного обмена между соседними ионами никеля ведет к спин-стеклольному состоянию, наблюдающемуся ниже 5K в каждом соединении. Эффекты, связанные с дефектами никелевой цепочки, указывают на то, что никелевая подсистема в $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$ в упорядоченной области проявляет такие же свойства, как и в неупорядоченной халдейновской системе Y_2BaNiO_5 .

[1] J. Darriet and L.P. Regnault, *Solid State Commun.* **86**, 409 (1993).

[2] A. Zheludev, J.M. Tranquada, T. Vogt, and D.J. Buttrey, *Phys. Rev. B* **54**, 7210 (1996).

[3] J. Das, A.V. Mahajan, J. Bobroff, H. Alloul, F. Alet, and E. S. Sørensen, *Phys. Rev. B* **69**, 144404 (2004).

[4] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).

Фемтосекундная магнитооптика и сверхбыстрая магнитная динамика ферромагнетиков

М.И. Куркин¹, Н.Б. Орлова²

¹ Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, 620990, Россия

² Новосибирский технический университет, Новосибирск, 630092. Россия

e-mail: kurkin@imp.uran.ru

Процессы сверхбыстрой магнитной динамики пикосекундной длительности были обнаружены при воздействии лазерных импульсов с длительностью $\tau_p < 100 \text{ fs} = 10^{-13} \text{ s}$ [1,2]. Это более чем 10^3 раз короче наносекундных процессов спиновой динамики, которые были известны в магнетизме до использования методов фемтосекундной оптики. Предложено два варианта преодоления этой трудности. Один из них предполагает внесение изменений в существующую спиновую теорию, достаточных для участия спинов в процессах пикосекундной длительности [3]. Второй вариант связывает эти процессы с орбитальным, а не спиновым магнетизмом [4]. В нашем докладе предполагается обсудить проблемы орбитальной модели сверхбыстрой магнитной динамики.

Проблема оптического размораживания орбитального магнетизма

Равенство $\langle \mathbf{L} \rangle = 0$ для средних значений орбитальных моментов \mathbf{L} в состоянии равновесия с кристаллическим полем \mathbf{H}_{cr} получило название эффекта замораживания. Оно обусловлено эквивалентностью противоположных направлений \mathbf{L} в поле \mathbf{H}_{cr} . Снятие этого вырождения, ответственное за $\langle \mathbf{L} \rangle \neq 0$, обычно называют размораживанием. Обсуждение замораживания $\langle \mathbf{L} \rangle$ при воздействии фемтосекундных циркулярно поляризованных лазерных импульсов составляет содержание первой части нашего доклада. Взаимодействие оптически размороженных моментов $\langle \mathbf{L} \rangle$ с полем \mathbf{H}_{cr} обеспечивает необходимую пикосекундную длительность процессов с участием $\langle \mathbf{L} \rangle$.

Проблема релаксации оптически размороженных орбитальных моментов

Влияние размороженных моментов $\langle \mathbf{L} \rangle$ на другие более медленные процессы в веществе определяются их временем жизни τ_L после оптической накачки. Обсуждение цепочки процессов, обеспечивающих релаксацию $\langle \mathbf{L} \rangle$, составляет содержание второй части нашего доклада. Самым медленным из процессов этой цепочки («узким горлом») является превращение коротковолновых фононов (возбуждаемых при передаче углового момента от $\langle \mathbf{L} \rangle$ ионам решётки) в длинноволновые (обеспечивающие удаление этого момента из образца). Благодаря такому «узкому горлу» время τ_L может превысить наносекундную длительность спиновых процессов. Тогда спины могут успеть переориентироваться в спин-орбитальном поле моментов $\langle \mathbf{L} \rangle$.

Проблема описания переориентации спинов под действием оптически размороженных орбитальных моментов

Переориентация спинов \mathbf{S} предполагает удаление из образца углового момента, который высвобождается при изменении направления \mathbf{S} . Время такого удаления τ_S должно удовлетворять условию $\tau_S < \tau_L$. Обсуждение процессов, определяющих величину τ_S , составляет содержание третьей части нашего доклада. Обменное упорядочение спинов \mathbf{S} и парамагнетизм моментов \mathbf{L} обеспечивает отличие процессов спиновой и орбитальной релаксации, с которыми связано условие $\tau_S < \tau_L$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 14-02-00260).

[1] E. Beaurepaire et. al. Phys. Rev. Lett., **76**, 4250 (1996).

[2] C.D. Stanciu et. al. Phys. Rev. Lett., **99**, 047601 (2007).

[3] A. Kirilyuk, A. Kimel, Th. Rasing. Rev. Mod. Phys., **82**, 2731 (2010).

[4] M.I. Kurkin, N.B. Orlova. JMMM, **361**, 224 (2014).

Роль ферромагнитных корреляций в генезисе электронного спинового резонанса в системе $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{V}_6$

А.В. Семенов¹, М.И. Гильманов¹, А.Н. Самарин¹, А.В. Богач¹, В.Н. Краснорусский¹,
Н.Ю. Шицевалова², В.Б. Филиппов², С.В. Демишев¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

²Институт проблем материаловедения НАНУ, Киев, Украина

e-mail: semeno@lt.gpi.ru

Обнаружение электронного спинового резонанса (ЭСР) в тяжелофермионном металле CeV_6 [1,2] породило ряд вопросов относительно природы этого явления. Сильные электронные флуктуации в концентрированных Кондо-системах приводят к значительному уширению резонансной линии, препятствующему экспериментальному наблюдению ЭСР. В соответствие с теоретическими рассмотрениями условий ЭСР, наблюдение резонанса возможно только в случае ферромагнитных (ФМ) корреляций в таких системах, что хорошо подтверждается экспериментально [3]. В этом отношении CeV_6 представляет собой исключительный случай антиферромагнитной концентрированной Кондо-системы, демонстрирующей ЭСР поведение. Другим важным аспектом этой проблемы является связь возникновения ЭСР поглощения с формированием в системе антиферроквадрупольного (АФК) упорядочения. Таким образом, природа формирования ЭСР в CeV_6 требует специального теоретического рассмотрения [4], в котором предполагается возникновение ФМ взаимодействий, вызванных АФК упорядочением. Недавние исследования нейтронного рассеяния подтвердили наличие в CeV_6 при низких температурах как АФМ, так и ФМ взаимодействий [5]. Этот результат позволяет предполагать, что природа основного состояния CeV_6 определяется конкуренцией этих двух механизмов. Для исследования этого вопроса в настоящей работе выполнены измерения высокочастотного (60 ГГц) ЭСР и статической намагниченности твердых растворов замещения $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{V}_6$ в области концентраций $x < 0.3$.

Поскольку в ЭСР-экспериментах металлов наблюдается отклик скин-слоя образца, принципиальное значение имеет вопрос о роли поверхностных эффектов. Для выяснения этого вопроса было применено сопоставление фазовых границ между парамагнитной (ПМ) и антиферроквадрупольной (АФК) фазами, полученных из особенностей микроволновой (поверхностной) проводимости, с границами, полученными из зависимостей намагниченности и d.c. проводимости, которые соответствуют объемным свойствам. В результате, был подобран метод обработки поверхности образцов, который привел к совпадению этих границ (рис.1).

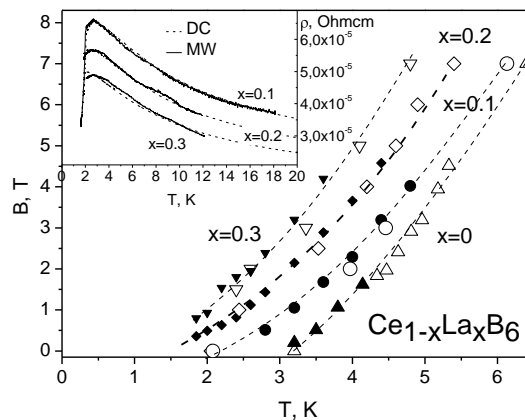


Рис. 1 Фазовые диаграммы образцов $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{V}_6$, полученные из зависимостей микроволнового поглощения (белые символы) и объемных параметров (черные символы).

При исследовании ЭСР в системе $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$ для $x=0;0.1;0.2;0.3$ в направлении магнитного поля вдоль оси [110] обнаружено, что замещение церия лантаном приводит к сильному уширению резонансной линии и уменьшению ее интенсивности (рис. 2). При этом, в соединении с $x=0.1$, как и в чистом CeB_6 , в АФК фазе наблюдается ЭСР с типичной для металлов формой линии, положение которой соответствует g -фактору $g=1.6$. При концентрации лантана $x=0.2$ резонанс значительно уширяется, а увеличение концентрации до $x=0.3$ приводит к полному подавлению магнитного резонанса.

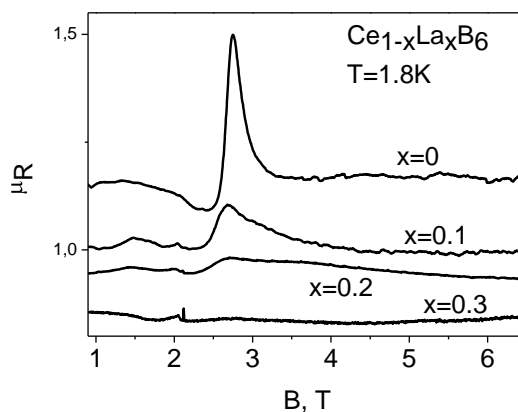


Рис.2 Спектры ЭСР для $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$ при $T=1.8\text{K}$.

Измерения намагниченности образцов $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$ показали, что увеличение концентрации лантана приводит к понижению температуры ПМ-АФК перехода, а также к сильному уменьшению намагниченности в АФК фазе. При этом изменяется характер полевых зависимостей намагниченности: у составов с большим содержанием La для достижения насыщения требуются большие магнитные поля. Такое поведение свидетельствует о подавлении при увеличении концентрации лантана ферромагнитных корреляций в АФК фазе. Данный вывод хорошо согласуется с наблюдаемым изменением характеристик ЭСР. Поскольку ширина резонансной линии в концентрированных Кондо-системах обратно пропорциональна магнитной восприимчивости χ [5], то подавление ФМ корреляций при увеличении концентрации лантана приводит к уширению (при $x=0.1$ и $x=0.2$) резонансной линии и далее к полному подавлению (при $x=0.3$) резонансного поведения.

Данная работа поддержана грантом РФФИ 14-02-00800 и программами РАН «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии» и «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием».

- [1] S.V. Demishev et.al., Phys. Status Solidi B, **242**, R27 (2004).
- [2] S.V. Demishev et.al., Phys. Rev. B, **80**, 245106 (2009).
- [3] C. Krellner et.al., Phys.Rev.Lett., **100**, 066401 (2008).
- [4] H. Jang et.al., Nature Materials, **13**, 682–687 (2014).
- [5] P. Schlottmann, Phys. Rev. B, **86**, 075135 (2012).

Magnetic Phase Diagrams of $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{P}_2\text{O}_{14}$ and $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{As}_2\text{O}_{14}$ Dugganites

M.M. Markina, B.V. Mill, E.A. Ovchenkov, E.A. Zvereva, and A.N. Vasiliev

Lomonosov Moscow State University, 119991, Leninskie Gory, Moscow, Russia

e-mail: markina@lt.phys.msu.ru

The dugganites being a Te-based subgroup of langasites represent quite versatile family of compounds [1]. The dugganite itself, $\text{Pb}_3\text{TeZn}_3\text{As}_2\text{O}_{14}$, is non-magnetic, but its Co-based counterparts contain magnetically active ions in C-sites. There are three members in this subgroup of dugganites, namely $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{P}_2\text{O}_{14}$ (PTCP), $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{V}_2\text{O}_{14}$ (PTCV) and $\text{Pb}_3\text{TeCo}_3\text{As}_2\text{O}_{14}$ (PTCA). The crystal structure of V-based and P-based compounds is monoclinically distorted with $P121$ space group [2-4]. In the crystal structure of dugganites, both large CoO_4 and small (V, P, or As) O_4 tetrahedra constitute slightly corrugated layers with a triangular motif in the arrangement of magnetically active Co^{2+} ions. Another layer is organized by PbO_{10} decahedra and TeO_6 octahedra. The magnetism in Co-based dugganites is due to Co solely since the V ions in D-sites are in pentavalent state V^{5+} , $S = 0$. In PTCV an antiferromagnetic ordering takes place through succession of second-order phase transition at $T_{N1} = 8.9$ K and first-order phase transition at $T_{N2} = 6.3$ K. The specific magnetic phase diagram of PTCV was discussed recently [5]. PTCP orders antiferromagnetically at $T_N = 12.9$ K [3,4]. The magnetic structure of this compound was indexed with propagation vector $\mathbf{q} = (1/3, 1/3, 1/2)$ indicating that there are ferromagnetic triangular cobalt clusters coupled antiferromagnetically both in the ab -plane and along the c -axis [3].

To establish the magnetic phase diagrams of PTCP and PTCA dugganites was the primary goal of the present work. It was realized in measurements of thermodynamic properties over wide ranges of magnetic field and temperature on polycrystalline samples. The magnetization $M(B,T)$ and specific heat $C(B,T)$ measurements were done using “Quantum Design” PPMS-9T. We also perform the $M(B,T)$ measurements up to 25 T in the pulse magnetic field regime. The parameters of magnetic subsystem are very close for PTCP and PTCA samples. These parameters are listed in the Table I and compared with parameters of PTCV [5]. The values of effective magnetic moment are in good agreement with theoretical estimation for the Co^{2+} in high-spin state $S = 3/2$. Low-frequency electron spin resonance (ESR) studies were carried out using an X-band ESR spectrometer CMS 8400 (ADANI) ($f \approx 9.4$ GHz, $B \leq 0.7$ T) equipped with a low temperature mount, operating in the range $T = 5 - 300$ K. The effective g -factors of our samples have been calculated with respect to a BDPA reference.

Table I. The parameters of magnetic subsystem for Co-based dugganites.

Substance	T_N , K	θ_p , K	μ_{eff} , μ_B	$ \theta_p /T_N$	χ_0	g -factor
PTCV [5]	6.3, 8.9	- 25	7.90	2.8	0.00167	2.45
PTCP	12.8	- 23.6	7.91	1.6	0.00144	2.19
PTCA	16.7	- 26.4	7.76	1.8	0.00084	2.20

The 2nd order phase transition at Neel temperature manifests itself as the λ -type peak on the derivative of magnetic susceptibility and on the $C(T)$ dependences, shown in Fig.1. When measured at higher magnetic fields, the signatures of the phase transitions shift to lower temperatures and broaden. The 1st order phase transition at spin-flop temperature manifests itself as the substantial change of the $M(B)$ slope and their derivation at B^* as shown in Fig.2. Under temperature increase the magnetization curve becomes practically linear for PTCA. For

PTCP the dM/dB vs B curve's singularities shifting to lower magnetic fields and smearing with increasing temperature mark the field-induced phase transition.

The data collected in $M(B,T)$ and $C(B,T)$ measurements are used to establish the magnetic phase diagram of PTCP and PTCA, shown in Fig.3. In the case of PTCP and PTCA the magnetic ordering formation occurs in one step at T_N , but we find some additional anomalies on dM/dT and dM/dB curves which are reflected on the phase diagram as extra lines inside AFM region. These lines can be connected with some transformation of the ordered magnetic subsystems under external field.

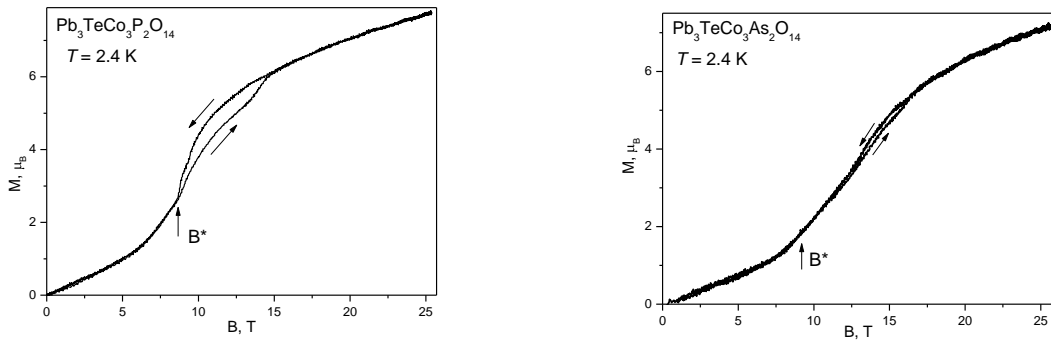


Fig. 1. The magnetization curves in PTCP (left panel) and PTCA (right panel) taken in pulsed magnetic field.

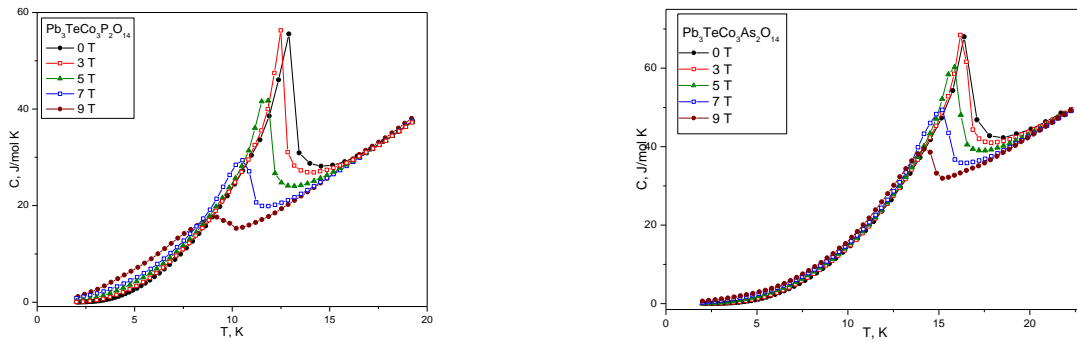


Fig 2. The temperature dependences of specific heat in PTCP (left panel) and PTCA (right panel).

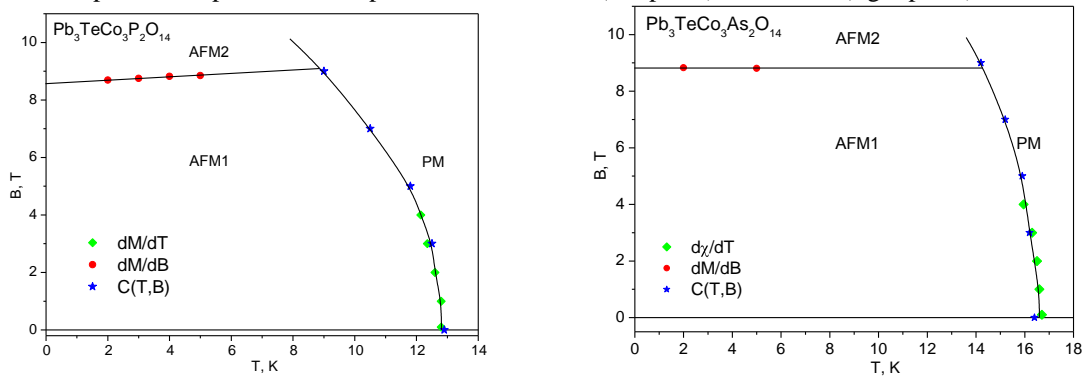


Fig 3. The magnetic phase diagram of PTCP (left panel) and PTCA (right panel) as defined from thermodynamic measurements.

[1] B.V. Mill, Russ. J. Inorg. Chem., **54**, 1205 (2009).
 [2] H.J. Silverstein, et al., Chem. Mater., **24**, 664 (2012).
 [3] J.W. Krizan, et al., J. Solid State Chem., **203**, 310 (2013).
 [4] H.J. Silverstein, et al., J. Phys.: Condens. Matt., **25**, 246004 (2013).
 [5] M.M. Markina, et al., Phys. Rev. B **89**, 104409 (2014).

Magnetic Field Driven 2D-3D Crossover in the $S=1/2$ Frustrated Chain Magnet LiCuVO_4

L.A. Prozorova,¹ S.S. Sosin,¹ L.E. Svistov,¹ O.A. Petrenko² and N. Buttgen³

¹P. Kapitza Institute for physical problems, 119334, Kosygina str., Moscow, Russia

²University of Warwick, Coventry CV4 7AL, UK

³Universitat Augsburg, D--86135 Augsburg, Germany

e-mail: sosin@kapitza.ras.ru

We report on a heat capacity study of high quality single crystal samples of LiCuVO_4 – a frustrated spin $S=1/2$ chain system – in magnetic field amounting to $3/4$ of the saturation field. This compound is an example of a quasi-1D magnet whose unconventional magnetic phases result from a competition of ferromagnetic and antiferromagnetic exchange interactions between nearest-neighbor and next-nearest neighbor in-chain spins. Our work focuses on a study of the magnetic transitions into the helical and field induced spin-modulated (SM) ordered phases arising due to this particular combination of exchange interactions. The helical state occurs at low fields up to about 7 T via a sharp lambda anomaly in the specific heat curves followed by $C \propto T^3$ 3D behavior at lower temperatures (see Fig. 1). The transition into a SM phase at higher fields is accompanied by a hump-like anomaly which, as the temperature decreases further turns into a $C \propto T^2$ law distinctive for a quasi-2D system.

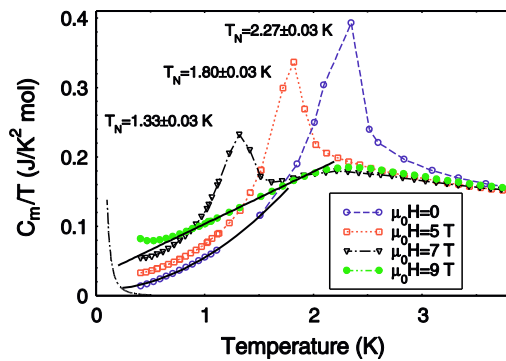


Fig. 1. Magnetic specific heat divided by temperature as a function of T obtained at several values of magnetic field (see legend), solid lines are quadratic and linear extrapolations to the zero field and 9-T curves respectively, dashed-dotted line is a contribution from Cu nuclei at the field 10 T.

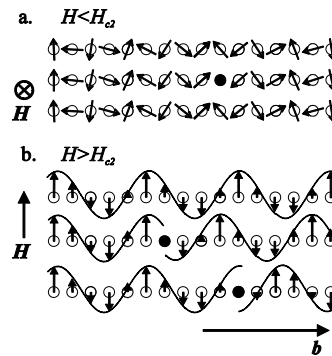


Fig. 2. Schematic diagram of the influence of defects on the spiral state (a) and the spin-modulated state at $\mu_0 H \approx 20$ T (b), defects are shown by black dots. The spiral state is nearly insensitive to the chain break while the phase of a spin-modulated chain is randomly shifted at the point of the defect.

We suggest an explanation for this phenomenon based on the presence of nonmagnetic defects in the Cu^{2+} chains. The hole in the chain does not significantly disturb the helical magnetic structure since the incommensurate wave vector of the helix is close to π (see Fig. 2). On the contrary, the wave vector of a SM structure is elongated under field, thus leading to a random shift of the phase in the chain at each defect. This shift prevents the interchain exchange interactions from stabilizing a coherent 3D magnetic ordering, and the system remains in an effectively 2D ordered state. This model eliminates the existing discrepancy in interpretations of NMR [1] and neutron scattering measurements [2] resolving the existing discrepancy in their interpretations.

[1] N. Buttgen *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 214421 (2012).

[2] M. Mourigal *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 027203 (2012).

Магнитные сверхтонкие поля в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$

П.А. Агзамова^{1,2}, А.Е. Никифоров², В.П. Петров², В.А. Чернышев², Д.В. Назипов²

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, 620990, ул. С. Ковалевской, г. Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет им. первого Президента РФ Б.Н. Ельцина, 620002, ул. Мира, г. Екатеринбург, Россия

e-mail: polly@imp.uran.ru

В последние несколько лет магнитные оксиды со структурой пирохлора $R_2M_2O_7$ (R –редкоземельный ион или Y , M – ион переходного металла) являются объектами повышенного внимания благодаря необычным низкотемпературным магнитным свойствам и наличию сильной геометрической фрустрации.

Среди пирохлоров $R_2M_2O_7$ соединение $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ является наиболее простым для исследований в силу наличия лишь одного магнитного иона V^{4+} с $3d^1$ -конфигурацией в M -подрешётке. Одна из причин, поддерживающих интерес к такой простой системе, заключается в том, что до настоящего времени не выяснен вопрос о влиянии орбитального упорядочения $3d$ -ионов ванадия (имеющих орбитальное вырождение) на магнитные свойства веществ с сильной геометрической фрустрацией.

Для орбитальной степени свободы количественным параметром порядка является $3d$ -квадрупольный момент электрона иона переходного металла, который численно можно определить методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Такие исследования были проведены для монокристалла $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ на ядре ^{51}V при $T=5\text{K}$ в работе [1], где были получены угловые зависимости спектра ЯМР и проведено компьютерное моделирование спектра.

Спектр ядерного магнитного резонанса определяется сверхтонким взаимодействием, поэтому данная работа посвящена теоретическому исследованию сверхтонких взаимодействий, возникающих на ядрах ^{51}V в пирохлоре $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$, с использованием микроскопического модельного и *ab initio* подходов.

Гамильтониан сверхтонкого взаимодействия в $3d^1$ -переходных металлах определяется электрическим и магнитным сверхтонкими взаимодействиями.

В рамках *ab initio* подхода в программе CRYSTAL09, предназначенной для периодических структур, с использованием метода неограниченного Хартри-Фока выполнена серия расчётов параметров, определяющих сверхтонкую структуру спектра: констант магнитной сверхтонкой связи и ядерного квадрупольного взаимодействия. Расчёты проводились как для ферромагнитной, так и для антиферромагнитной фаз $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$. Было показано:

- для данного соединения ферромагнитная фаза энергетически выгоднее, чем антиферромагнитная;
- вклад от электрического сверхтонкого взаимодействия является незначительным (что согласуется с экспериментальными данными [1]), следовательно, спектр ядерного магнитного резонанса на ядре ^{51}V в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$ определяется только магнитным сверхтонким взаимодействием;
- рассчитанные величины констант изотропной и анизотропной сверхтонкой связи находятся в хорошем согласии с параметрами [1].

В рамках модельного подхода в теории кристаллического поля в приближении точечных зарядов рассчитана электронная структура $3d^1$ -уровня V^{4+} в промежуточном кристаллическом поле D_{3d} -симметрии и получены волновые функции основного

состояния иона ванадия. Учёт волновых функций в расчёте магнитных сверхтонких взаимодействий позволил определить $3d$ -квадрупольный момент электрона для каждого иона V в V_4 -тетраэдре и построить угловые зависимости спектра ядерного магнитного резонанса во внешнем магнитном поле. Из анализа угловых зависимостей спектра были извлечены параметры магнитных изотропного и анизотропного сверхтонких взаимодействий, которые находятся в хорошем согласии, как с величинами, рассчитанными в *ab initio* подходе, так и с полученными экспериментально.

При проведении *ab initio* расчётов был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

Работа поддержана РФФИ (проект 14-02-00260).

[1] T. Kiyama, T. Shiraoka, M. Itoh et. al., Phys. Rev. **B73**, 18, 184422 (2006).

Дальний магнитный порядок в квазидвумерном антиферромагнетике Cu(OH)F

И.Л. Данилович, А.В. Меркулова, И.В. Морозов, Е.А. Овченков, Е.А. Зверева,
А.Н. Васильев.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д. 1, 119991, Москва, Россия

email: danilovichigor@gmail.com

В настоящей работе исследованы температурные зависимости магнитной восприимчивости χ и теплоемкости C_p , а также полевые зависимости намагниченности M в квазидвумерном гидроксигалогениде меди Cu(OH)F. Ионы двухвалентной меди Cu²⁺ координированы по октаэдру, искаженному вследствие эффекта Яна-Теллера. В вершинах октаэдра расположены ионы фтора F¹⁻ и ионы кислорода O²⁻, принадлежащего гидроксильным группам (OH)¹⁻. Кристаллическая структура Cu(OH)F может быть представлена в виде лежащих в плоскости *ab* слоев, соединенных между собой по ребру полиэдров Cu(OH)₃F₃ с водородными связями между слоями вдоль оси *c* [1]. В пределах слоя ионы Cu²⁺ связаны между собой обменным взаимодействием по связям Cu – O – Cu и Cu – F – Cu (рис. 1).

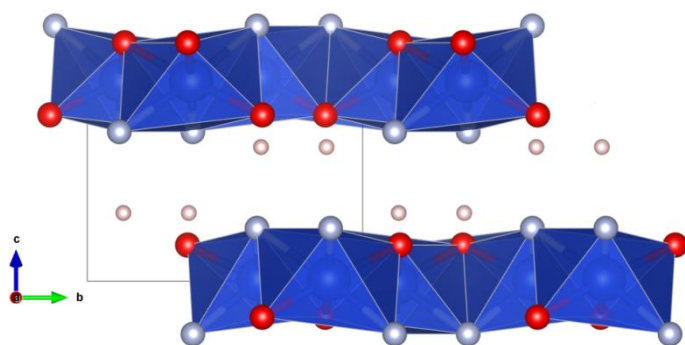


Рис. 1. Кристаллическая структура Cu(OH)F в полиэдрическом представлении в плоскости *bc*. Ионы меди в центрах октаэдров координированы ионами фтора и кислорода. Несвязанные в полиэдрах ионы водорода показаны изолированными сферами.

Синтез Cu(OH)F был проведен согласно реакции: $\text{CuF}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{Cu(OH)F} + \text{HF}$. Для

приготовления прекурсора CuF₂·2H₂O малахит растворяли в избытке концентрированной плавиковой кислоты с последующим упариванием. Далее был проведен гидролиз CuF₂·2H₂O кипячением водного раствора в течение нескольких дней. Продукт реакции, представлявший собой осадок светло-оливкового цвета, был отделен от раствора на центрифуге и высушен на воздухе. Измерения термодинамических свойств Cu(OH)F были проведены с помощью системы “Quantum Design” PPMS-9T, измерения g-фактора проводились с помощью спектрометра “Adani”.

В широком интервале температур магнитная восприимчивость Cu(OH)F подчиняется модифицированному закону Кюри-Вейсса $\chi = \chi_0 + C/(T - \Theta)$, в котором учтен вклад слагаемого χ_0 , не зависящего от температуры (рис. 2). Из обработки зависимости $\chi(T)$ в интервале температур $T = 200 \div 300$ К следует, что $\chi_0 = 2.15 \times 10^{-5}$ emu/mol, константа Кюри $C = 0.44$ emu/mol·K и температура Вейсса $\Theta = 15$ К. Постоянная по температуре составляющая магнитной восприимчивости обязана сумме диамагнитных вкладов Паскаля от ионов всех химических элементов в структуре Cu(OH)F $\chi_0^{\text{dia}} = -3.2 \times 10^{-5}$ emu/mol, а также парамагнитному вкладу ионов меди χ^{v} . Парамагнитный вклад ван Флека для ионов меди Cu²⁺ в координационных соединениях составляет $\chi^{\text{v}} \sim 5.5 \times 10^{-5}$ emu/mol [2].

Определенная экспериментально константа Кюри определяет эффективный магнитный момент в Cu(OH)F как $\mu_{\text{eff}} = 1.87 \mu_B$, что может быть сопоставлено со

значением эффективного магнитного момента свободного иона меди $\mu_{Cu} = 1.73 \mu_B$. Это, в свою очередь, определяет величину g – фактора $g \sim 2.17$, что полностью согласуется с результатами измерений электронного парамагнитного резонанса при комнатной температуре. Положительное значение температуры Вейсса Θ указывает на преобладающую роль ферромагнитного взаимодействия в магнитной подсистеме $Cu(OH)F$. Ее величина $\Theta = 2Z_1S(S+1)|J_1|/3$ определяет масштаб доминирующего взаимодействия $J_1 = -5$ К в предположении числа ближайших соседей в слое $Z_1 = 6$.

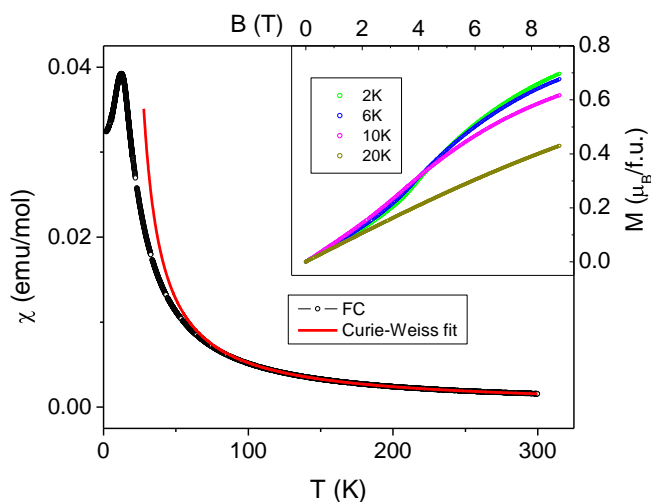
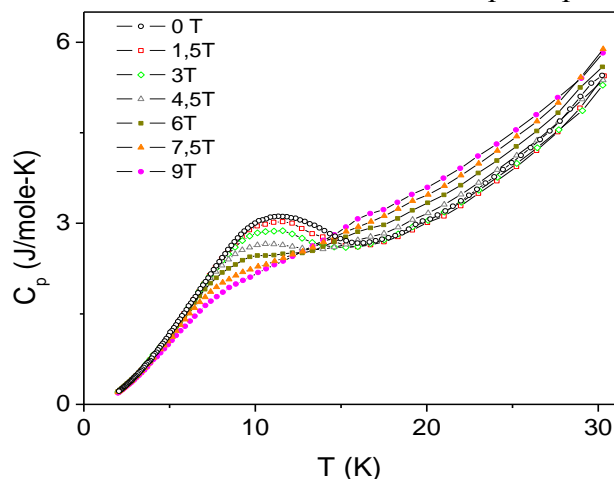


Рис. 2. Температурная зависимость магнитной восприимчивости в $Cu(OH)F$ в магнитном поле $B = 0.1$ Т. Сплошной линией показана обработка экспериментальных данных модифицированным законом Кюри-Вейсса. На вставке показаны полевые зависимости намагниченности при некоторых температурах в интервале 2 - 20 К.

антиферромагнитного порядка при низких температурах. Если предположить, что ферромагнитное взаимодействие между ионами меди Cu^{2+} формируется в пределах слоя $Cu(OH)_3F_3$, то взаимодействие между слоями должно быть антиферромагнитным. В предположении, что температура Вейсса T_N связана с параметрами обменного взаимодействия качественным соотношением $T_N \sim (Z_1|J_1| \times Z_2|J_2|)^{1/2}$, где $Z_2 = 2$ и J_2 – число ближайших соседей и параметр обмена для межслоевого взаимодействия, можно оценить масштаб $J_2 \sim 3$ К. Характер полевых зависимостей намагниченности в

На температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ наблюдается максимум при $T_N = 12.5$ К, который может быть связан с формированием дальнего



$Cu(OH)F$ указывает на то, что под действием магнитного поля в антиферромагнитной фазе реализуется спин-флоп переход (рис.2, на вставке).

Рис. 3. Температурные зависимости теплоемкости $Cu(OH)F$ в различных магнитных полях в интервале $B = 0 - 9$ Т.

Переход гидроксигалогенида меди $Cu(OH)F$ в магнитоупорядоченное состояние подтверждается измерениями теплоемкости (рис. 3). На зависимости $C_p(T)$ при $B = 0$ Т виден широкий

максимум, который смещается в область более низких температур с увеличением магнитного поля. Этот факт согласуется с предположением о подавлении дальнего антиферромагнитного порядка во внешнем магнитном поле.

[1] G. Giester, Libowitzky, Z. Kristallogr. **218**, 351 (2003).
 [2] G.A. Bain and J.F. Berry, J. Chem. Educ., **85**, 532 (2008).

Влияние замещений в 3d-подсистеме на обменные взаимодействия в соединениях на основе NdMnGeЮ.А.Овченкова¹, А.Е.Богданов¹, А.В.Смирнов¹, А.В.Морозкин²¹ МГУ им.М.В.Ломоносова, физический факультет, 119991, Ленинские горы, д.1 стр.2, Москва, Россия² МГУ им.М.В.Ломоносова, химический факультет, 119991, Ленинские горы, д.1 стр.3, Москва, Россияe-mail: ovtchenkova@mail.ru

Соединения $R\text{MnX}$ (R – редкоземельный металл, X – Si или Ge) являются двухподрешеточными магнетиками со слоистой кристаллической структурой – атомы редкой земли, марганца и Si или Ge расположены в изолированных слоях. Особенностью этих соединений является сочетание локализованного магнитного момента в $4f$ -подрешетке с зонным магнетизмом $3d$ -подрешетки. Частичное перекрытие подрешеток $3d$ и $4p$ элементов приводит к частичному дозаполнению $3d$ -зоны Mn электронами Si или Ge. В результате магнитный момент $3d$ подрешетки сильно зависит от межатомных расстояний, а замещения в $3d$ -подрешетке оказывают сильное влияние на магнитные свойства этих составов. Сочетание довольно высоких концентраций редкой земли и $3d$ -металла приводит к необходимости учета при анализе магнитных свойств этих соединений нескольких основных типов обменных взаимодействий: Mn-Mn, R-Mn и R-R. Конкуренция между этими взаимодействиями, в ряде случаев, может приводить к последовательным магнитным и даже магнитоструктурным фазовым переходам.

В прошлых работах нами было показано, что введение немагнитного Ti в составы на основе GdMnSi приводит к существенному монотонному росту температур магнитного упорядочения, т.е. к усилению обменных взаимодействий внутри этих составов [1]. Из измерений намагниченности на монокристалле GdMnSi при низких температурах нам удалось установить иерархию обменных взаимодействий в этом соединении. Оказалось, что в этом соединении сильные взаимодействия внутри подрешеток Mn и Gd сочетаются со слабым межподрешеточным взаимодействием Gd-Mn [2].

В данной работе мы провели исследования изоструктурного соединения на основе NdMnGe с небольшим введением Ti в подрешетку Mn.

Образцы $\text{NdMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Ge}$ ($x=0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5$) были синтезированы методом электродуговой плавки с последующим изотермическим отжигом. Аттестация образцов производилась методом рентгеноструктурного анализа и локального спектрального анализа. Образцы NdMnGe , $\text{NdMn}_{0.95}\text{Ti}_{0.05}\text{Ge}$ и $\text{NdMn}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{Ge}$ оказались рентгеновски однофазными. Они имеют тетрагональную структуру типа CeFeSi (пространственная группа $R4/nmm$), введение Ti приводит к монотонному росту параметра кристаллической ячейки c , в то время как изменения параметра a оказались незначительными. Образцы $\text{NdMn}_{0.8}\text{Ti}_{0.2}\text{Ge}$ и $\text{NdMn}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{Ge}$ оказались сильно неоднородными и дальнейшие измерения на них не проводились.

На составах $\text{NdMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Ge}$ ($x=0, 0.05, 0.1$) были проведены измерения намагниченности в интервале температур от 2 до 350 К и магнитокалорического эффекта в районе температуры Кюри.

Результаты измерений намагниченности при низких температурах и температурная зависимость намагниченности для составов NdMnGe и $\text{NdMn}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{Ge}$

представлены на рис. 1 и 2.

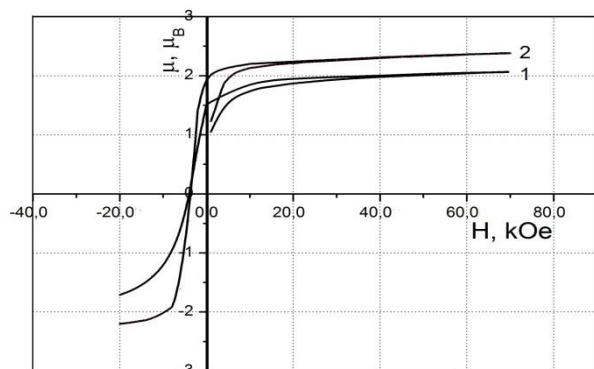


Рис. 1. Кривые намагничивания соединений NdMnGe (1) и NdMn_{0.9}Ti_{0.1}Ge (2) при T = 5 К.

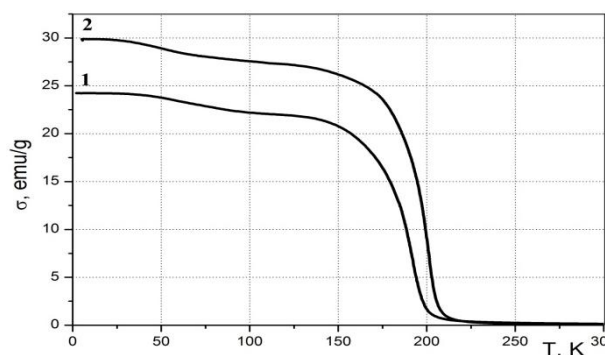


Рис. 2. Температурные зависимости намагниченности соединений NdMnGe (1) и NdMn_{0.9}Ti_{0.1}Ge (2), измеренные в поле 1 кЭ.

Нейтроннографические исследования состава NdMnGe [3] выявили наличие 3 магнитных фазовых переходов: подрешетка Mn упорядочивается антиферромагнитно при T = 410 К, при T = 200 К возникает ферромагнитное упорядочение в подрешетке Nd, причем магнитные моменты Nd оказываются в плоскости, перпендикулярной плоскости упорядочения подрешетки Mn, а ниже 100 К происходит переориентационный магнитный фазовый переход и возникает антиферромагнитная составляющая в подрешетке Nd, тогда как подрешетка Mn не претерпевает никаких изменений от 4.2К и вплоть до температуры Нееля.

Наши измерения показали что: 1. Введение Ti в подрешетку Mn увеличивает температуру упорядочения редкоземельной подсистемы, т.е. усиливается косвенный обмен между слоями редкой земли через слои 3d и 4p элемента. 2. Температура низкотемпературного спин-переориентационного перехода в подрешетке Nd, напротив, понижается. Наличие этого перехода скорее всего связано с конкуренцией положительных взаимодействий в подрешетке Nd с фрустрированными взаимодействиями между подрешетками Nd и Mn. Один атом Nd оказывается в симметричном окружении 4 атомов Mn, которые упорядочены между собой антиферромагнитно. 3. Введение Ti приводит к увеличению намагниченности образца и спонтанного магнитного момента. 4. Измерения магнитокалорического эффекта обнаружили небольшой положительный эффект около 0,35 К в районе температуры разупорядочения Nd, что согласуется с его ферромагнитным упорядочением.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-02-00916 А.

- [1] Nikitin S.A., Tskhadadze I.A., Morozkin A.V., Seropegin Yu D. *J.Magn.Magn.Mater*, **196** (1999) 632.
- [2] Ovtchenkova I.A., Nikitin S.A., Ivanova T.I., Tskhadadze G.A., Skourski Yu.V., Suski W., Nizhankovski V.I. *J.Alloys Compounds*, **451** (2008) 450.
- [3] R. Welter, G. Venturini, E. Ressouche, B. Malaman. *J.Alloys Compounds*, **228** (1995) 59.

Spin Dynamics of a Weakly Ordered $S=1/2$ Chain Antiferromagnet Sr_2CuO_3

E.G. Akimova,¹ L.A. Prozorova,¹ S.S. Sosin¹ and I.A. Zaliznyak²

¹P. Kapitza Institute for physical problems, 119334, Kosygina str., Moscow, Russia

²Brookhaven National Laboratory, 11973, Upton, New-York, USA

e-mail: akimova@kapitza.ras.ru

We report on the electron spin resonance (ESR) study of a nearly one-dimensional (1D) antiferromagnet Sr_2CuO_3 . This compound is known as a good realization of an $S=1/2$ Heisenberg chain system with the ratio of an intra- to interchain exchange interactions amounting to $J/J'=10^5$ ($J \approx 2200$ K) [1]. Although a long range ordering appears in the system below $T_N=5.4$ K, the ordered spin component determined from neutron scattering experiments does not exceed the value $0.06\mu_B$. Because of its nearly disordered ground state the system is expected to combine properties of a classical three-dimensional antiferromagnet and a quantum $S=1/2$ spin chain. It is therefore of interest to compare magnetic excitation spectra at different energy scales. We studied ESR spectra in an ordered and paramagnetic phases in the frequency range 18-140 GHz. The measurements were performed on a single crystal sample in magnetic field up to 9 T at temperatures from 1.3 to 50 K.

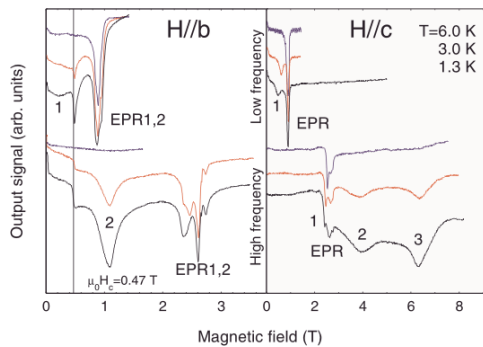


Fig. 1 Microwave resonance absorption spectra recorded at $H//b$ (left panel) and $H//c$ (right panel) at various temperatures. Upper and lower sets of curves correspond to low and high frequency measurements respectively. Different resonance modes are marked by numbers.

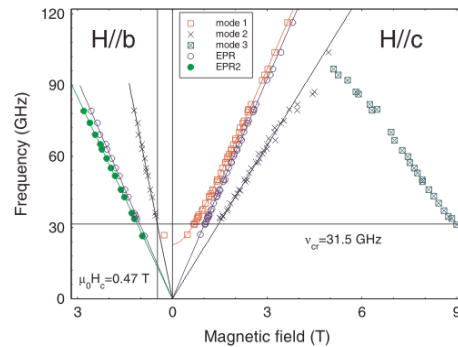


Fig. 2 Frequency-field diagrams of magnetic resonance spectra obtained for $H//b$ (left panel) and $H//c$ (right panel). Same resonance modes observed at both field directions are shown by same symbols (see legend). The horizontal line marks the edge frequency for modes 2,3.

Typical resonance spectra observed in two different directions of the applied field are presented in Fig. 1 and the corresponding resonance modes are summarized in Fig. 2. Among them there is an AFMR mode 1 with the gap appearing below T_N and growing up to the value of about 20 GHz as the temperature decreases to 1.3 K. A field induced phase transition occurred at $\mu_0 H_c=0.47$ T ($H//b$ -axis) leads to a transformation of the spectrum into a mode 2 which vanishes in intensity on approaching to T_N . Similar resonance modes 2,3 are observed at $H//c$ -axis at frequencies exceeding the threshold value $\nu_{cr} \approx 32$ GHz. These ordered phase modes coexist with gapless linear in field resonance branches with g -factors equal to 2.2 and 2.0. Different temperature dependences of integral intensities allow one to suggest their relation to both magnetic defects and magnetic excitations peculiar to a 1D spin chain.

[1] N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **76**, 3212 (1996).

[2] K.M. Kojima, Y. Fudamoto, M. Larkin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1787 (1997).

^{55}Mn Spin Echo Frustration in Magnon BEC State of MnCO_3 E.M. Alakshin¹, Yu.M. Bunkov^{1,2}, R.R. Gazizulin^{1,2}, A.V. Klochkov¹, T.R. Safin¹,
K.R. Safiullin¹, M.S. Tagirov¹¹Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya 18, Kazan, Russia²Institut Neel, CNRS et Universite Joseph Fourier, F-38042 Grenoble, Francee-mail: imfador@gmail.com

The phenomenon of Bose-Einstein condensation (BEC) for bosonic particles was predicted by A. Einstein in 1925 (see, e.g., [1]). It corresponds to the accumulation of major amount of particles at the ground-state level. The “pure” BEC state of ^{87}Rb atoms was experimentally observed in 1995 by E. Cornell [2]. The BEC state of quasiparticles (magnons) was experimentally observed in ^3He -B superfluid phase [3, 4]. The similar effect was found in the easy-plane antiferromagnets CsMnF_3 and MnCO_3 with strong electron-nuclear interaction [5-8]. The BEC of magnon was also found in yttrium-iron garnet at room temperature [9]. The conventional magnon BEC in ^3He manifests itself by a domain with a phase-coherent precession of magnetization, that is called Homogeneously Precessing Domain (HPD) [10]. This is the spontaneously emerging steady state of precession, which preserves the phase coherence across the whole sample even in the absence of energy pumping. The crucial property of HPD is that precession acquires a coherent phase throughout the whole sample even in an inhomogeneous external magnetic field. This is equivalent to the appearance of a coherent superfluid Bose condensate [11].

We report here further experimental investigations of antiferromagnet MnCO_3 . The unusual behavior of the echo signal was observed, which is well explained by magnon BEC formation in the sample. The experiments were done at the temperature of 1.5 K, RF frequency was 550.5 MHz, and magnetic field 172 mT. The complete experimental setup description can be found in [12].

It is known [13] that the echo signal in such system can be observed only within the small frequency shift (linear) regime, while the long lived free induction decay (magnon BEC state) can be observed with the frequency shift of several MHz. But in our experiments an external magnetic field (and frequency shift) has been adjusted in such way, that both echo signal and long lived free induction decay signal were observed simultaneously (fig. 1a.).

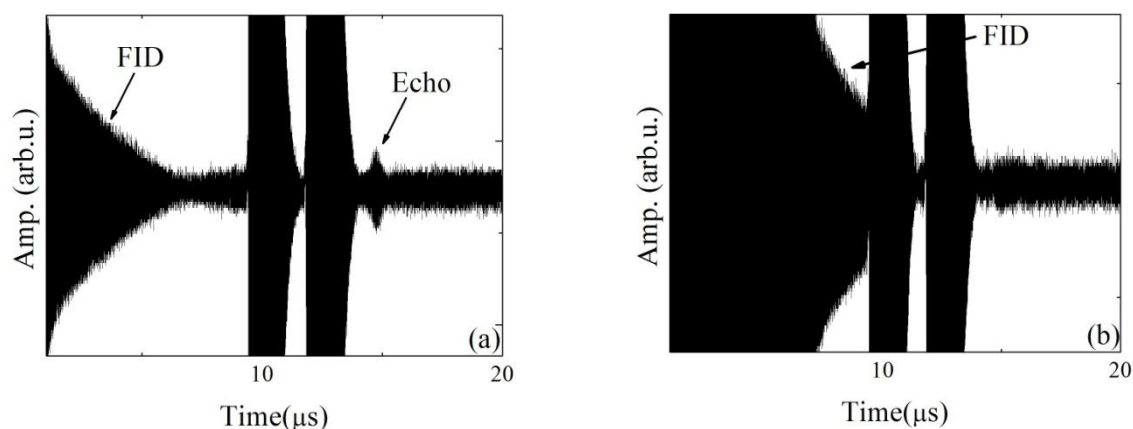


Figure 1. Long-lived free induction decay signal and echo. 11 μs (a) and 4 μs (b) delay between 100 ms pulse and echo pulse sequence has been applied.

RF pulse with the duration 100 ms followed after 11 μ s delay by another two pulses (0.4 μ s – 1.0 μ s – 0.4 μ s) for echo formation were applied.

Taking into account that long-lived FID signal corresponds to magnon BEC, it is interesting to try to form an echo signal on the tail of the FID signal. In a classical case the echo forming sequence should work independently. But in the case of the system in BEC state, the phase of the state cannot be changed by the external RF pumping. Thus, echo signal will not be formed. Indeed, as seen in fig 1b the echo signal is strongly suppressed, compared to fig 1a. Such behavior of the spin system may be explained in terms of HPD. In the absence of energy pumping this HPD state slowly decays (fig. 1a.), but during the decay the system remains in the coherent state of BEC (fig. 1b.), thus echo forming sequence does not take any effect.

The work is performed according to the Russian Government Program of Competitive Growth of Kazan Federal University and supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 14-02-31290 mol_a).

- [1] Giorgini F.S., Pitaevskii L.P., Stringari S., *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1215 (2008).
- [2] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman and E.A. Cornell, *Science*. **269**, No. 5221, pp. 198-201 (1995).
- [3] Borovik-Romanov A.S., Bunkov Yu.M., Dmitriev V.V., Mukharskiy Y.M., *JETP Lett.* **40**, 1033 (1984).
- [4] Borovik-Romanov A.S., Bunkov Yu.M., Dmitriev V.V., Mukharskiy Y.M., Sergatskov D.A., *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1631 (1989).
- [5] Bunkov Yu.M., Alakshin E.M., Gazizulin R.R., Klochkov A.V., Kuzmin V.V., Safin T.R., Tagirov M.S., *JETP Lett.* **94**, 68 (2011).
- [6] Alakshin E.M., Bunkov Yu.M., Gazizulin R.R., Klochkov A.V., Kuzmin V.V., Nizamutdinov A.S., Safin T.R., Tagirov M.S., *J. Phys.: Conf. Ser.* **324**, 012006 (2011).
- [7] Bunkov Yu.M., Alakshin E.M., Gazizulin R.R., Klochkov A.V., Kuzmin V.V., L'Vov V.S., Tagirov M.S., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 177002 (2012).
- [8] Tagirov M.S., Alakshin E.M., Bunkov Y.M., Gazizulin R.R., Gazizulina A.M., Isaenko L.I., Klochkov A.V., Safin T.R., Safiullin K.R., Zhurkov S.A., *J. Low Temp. Phys.* **175**, 167 (2014).
- [9] Demokritov S.O., Demidov V.E., Dzyapko O., Melkov G.A., Serga A.A., Hillebrands B., Slavin A.N., *Nature* **443**, 430 (2006).
- [10] Fomin I.A., *JETP Lett.* **40**, 1037 (1984).
- [11] Bunkov Y.M., Volovik G.E., *J. Phys.: Condens. Matter.* **22**, 164210 (2010).
- [12] Alakshin E.M., Bunkov Y.M., Gazizulin R.R., Klochkov A.V., Kuzmin V.V., Rakhmatullin R.M., Sabitova A.M., Safin T.R., Tagirov M.S., *Appl. Magn. Reson.* **44**, 595 (2013).
- [13] Alakshin E.M., Bunkov Yu.M., Gazizulin R.R., Isaenko L.I., Klochkov A.V., Safin T.R., Safiullin K.R., Tagirov M.S., Zhurkov S.A., *J. Phys.: Conf. Ser.* **568**, 042001 (2014).

Low Temperature Ultrasonic Relaxation in the Jahn-Teller Impurity Crystal ZnSe:Cr²⁺ in Magnetic Fields

N.S. Averkiev¹, I.B. Bersuker², V.V. Gudkov^{3,4}, S. Zherlitsyn⁵, S. Yasin⁵,
I.V. Zhevstovskikh^{3,6}, K.A. Baryshnikov¹, A.M. Monakhov¹, M.N. Sarychev³,
Yu.V. Korostelin⁷, V.T. Surikov⁸

¹A.F. Ioffe Physical Technical Institute of the RAS, 194021, 26, Polytekhnicheskaya st., St-Petersburg Russia

²Institute for Theoretical Chemistry, The University of Texas at Austin, TX 78712, USA

³Ural Federal University 620002, 19, Mira st., Ekaterinburg, Russia

⁴Russian State Vocational University, 620012, 11, Mashinostroiteleist., Ekaterinburg, Russia

⁵Hochfeld-Magnetlabor Dresden (HLD), Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, D-01314 Dresden, Germany

⁶M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the RAS, 620137, 18, Kovalevskaya st., Ekaterinburg, Russia

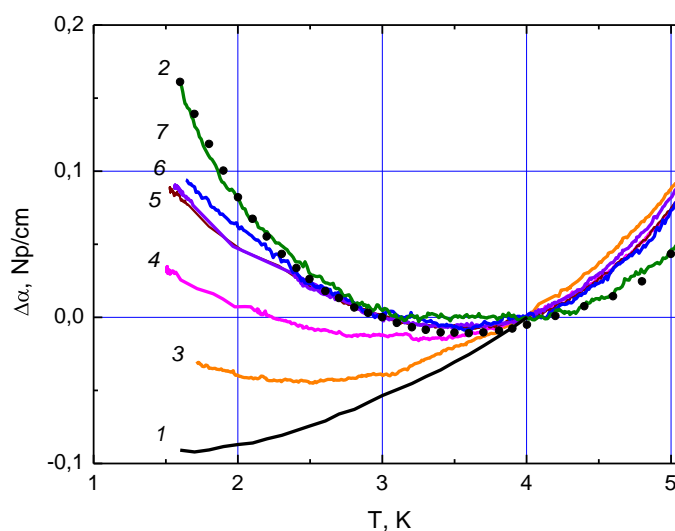
⁷P.N. Lebedev Physical Institute of the RAS, 119991, 53, Leninskiy prospekt, Moscow, Russia

⁸Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of the RAS, 620990, 91, Pervomaiskaya st., Ekaterinburg, Russia

e-mail: gudkov@imp.uran.ru

Magnetic field dependent Jahn-Teller (JT) impurity systems may be of particular interest in quantum-computing application. Our previous investigations of the ZnSe:Cr²⁺ crystal with Cr²⁺ JT centers revealed magnetic-field dependence of ultrasonic attenuation and velocity [1]. We have found resonance-like anomalies in relatively low fields ($B < 1$ T), with monotonic variations in higher fields. The high field variations were interpreted as due to the temperature dependent population of the energy levels calculated taking into account the vibronic and spin-orbital interactions [2].

Fig.1. Temperature dependence of ultrasonic attenuation $\Delta\alpha = \alpha(T) - \alpha(4K)$ of the slow shear wave in magnetic fields B (in Tesla units): 1 – $B=0$; 2 – $B=0.03$; 3 – $B=3$; 4 – $B=5$; 5 – $B=10$; 6 – $B=12$; 7 – $B=14$. Circles present simulation with $\tau_m = 1.23 \times 10^{-6}$ s (see below)



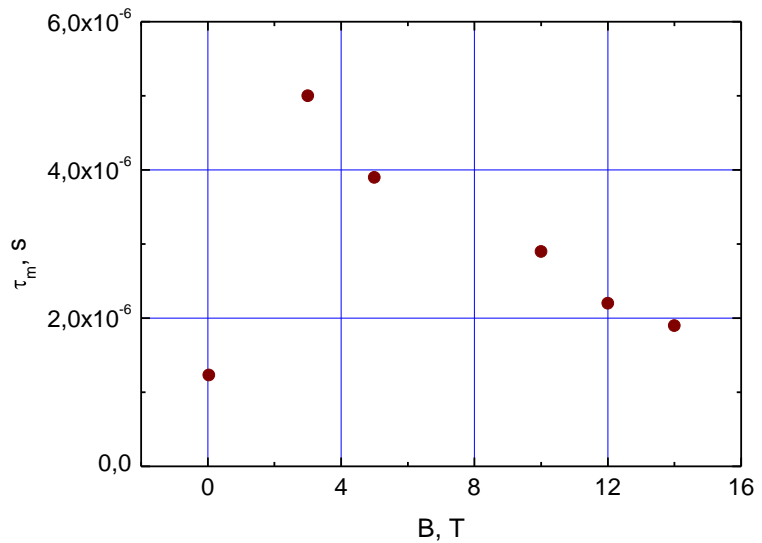
In the present paper we report new results obtained in the low-temperature dependence of ultrasonic attenuation in fixed magnetic fields. The concentration of chromium ions in ZnSe:Cr²⁺, measured using the ELAN 9000 ICP-MS quadrupole-based instrument (Perkin-Elmer SCIEX), is $n = 3.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. This crystal has a zinc-blende structure with tetrahedral surrounding of the chromium ion (electronic d^4 configuration) with a $^5T_2(e^2t^2)$ high spin ground state, subject to the $T \otimes (e + t_2)$ JT problem. The adiabatic potential energy surface has tetragonal global minima, and the relaxation of the displacements caused by the ultrasonic

wave at low temperatures is realized by tunneling or over-the barrier transitions between the equivalent distorted configurations via the orthorhombic saddle points [3]. Ultrasonic investigation has been carried out in the temperature interval $T= 1.6 \div 40$ K at the frequency $\omega/2\pi=29.5$ MHz. The waves propagated along the [110] crystallographic axis. The studied earlier anomalies in the temperature dependence of attenuation and velocity in zero fields caused by the JT centers are observed for longitudinal and slow shear modes, and are caused by the distortions of tetragonal symmetry produced by the wave (elastic modulus $C_s=(C_{11}-C_{12})/2$). External magnetic fields were applied in parallel to the wave vector, i.e., in our case – along to the [110] axis. As usual, the influence of the magnetic field is not observed for the waves for which the elastic displacements are parallel to the vector of magnetic induction \mathbf{B} . This was confirmed in our experiment as well: no magnetic field dependence was observed for the longitudinal wave, whereas it is clearly seen in the attenuation of the slow wave (see Fig.1). Relaxational attenuation α_r caused by the JT centers with tetragonal global minima is described by the expression (see, e.g., [3]):

$$\alpha_r = \frac{1}{2} k_0 \frac{na_0^2 F_E^2}{C_0 \kappa T} \cdot \frac{\omega \tau}{1 + (\omega \tau)^2}, \quad (1)$$

where κ is the Boltzmann constant, a_0 is the distance between the Cr-Se ions, F_E is the linear vibronic constant related to the E-type local displacements, τ is the relaxation time, C_0 is elastic modulus C_s defined at a reference temperature. At $B=0$ the electronic wavefunctions in the three tetragonal minima are mutually orthogonal (as in a $T \otimes e$ problem), so there is no significant tunneling between them at low temperatures. At $B>0$ the magnetic field mixes the electronic functions making them nonorthogonal, thus opening a new channel of tunneling and relaxation with the rate τ_m^{-1} .

Fig.2. Magnetic field dependence of relaxation time τ_m . The left symbol relates to $B=0.03$ T.



The latter can be estimated by combining the temperature dependence of relaxation time τ_T at $B=0$ obtained earlier [3] with those obtained in magnetic fields $B>0$ involving

a fitting procedure with Eq.(1). For $B=0.03$ T the fitting results are shown as circles in Fig.1. One can see that this model of relaxational attenuation is in good agreement with experimental data. The dependence of the relaxation time on the magnetic field due to this additional mechanism is shown in Fig.2.

Support by RFBR grant № 15-02-02750-a is acknowledged.

[1] V.V. Gudkov, I.B. Bersuker, S. Yasin *et al.* Solid State Phenomena **190** 707 (2012).
 [2] N.S. Averkiev, I.B. Bersuker, V.V. Gudkov *et al.* Moscow International Symposium on Magnetism 2014 .Book of Abstracts, p.519.
 [3] V.V. Gudkov, I.B. Bersuker, I.V. Zhevstovskikh *et al.* J. Phys.: Condens. Matter **23** 115401 (2011).

Coherence Times of Large-Spin Ensemble in Transient Regime

E.I. Baibekov

Kazan Federal University, 420008 Kremlevskaya 18, Kazan, Russian Federation

e-mail: edbaibek@gmail.com

It is common knowledge that, for quantum computation, one needs an ensemble of two-level quantum systems (qubits). However, it is equally possible to use N -level systems with $N>2$ [1]. Possible implementations of multilevel quantum computation scheme using electron spin states include single-molecule magnets and paramagnetic ions in S state [2]. Just like in the case of $N=2$, the spin states can be controlled by pulses of microwave (mw) field at resonance with a chosen transition.

The present work represents a theoretical study of decoherence in the ensemble of large-spin particles in the presence of mw field. Coherence times τ are calculated in the framework of a generalized model of dipolar relaxation in transient regime. A generalization of recently developed model for spin-1/2 particles [3] is obtained for the case of arbitrary N . In contrast to $N=2$ case, τ are temperature-dependent when $N>2$. Analytical expressions for τ as functions of N , spin concentration, mw frequency, Rabi frequency and temperature are derived. The results of the study can be used to simulate decays of spin nutations of large-spin particles diluted in solids.

Author acknowledges the support of the Russian President Fellowship for Young Scientists (stipend no. 924.2015.5), RFBR grant no. 14-02-00826 and Dynasty Foundation.

[1] M.A. Nielsen, I.L. Chuang. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, 2010.

[2] S. Bertaina et al, Phys. Rev. Lett. **102**, 050501(1-4) (2009).

[3] E.I. Baibekov, JETP Lett. **93**, 292-297 (2011).

Static and Dynamical Properties of Kondo Lattices

S.I. Belov, A.S. Kutuzov

Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya, 18, Kazan, Russia

e-mail: sergei.i.belov@gmail.com

We present a theoretical model to describe the unusual properties of Kondo lattices YbRh_2Si_2 and YbIr_2Si_2 . An approach based on the entirely local properties of Yb-ions in the crystal electric field successfully explains the temperature dependence of the static magnetic susceptibility below the thermodynamically measured Kondo temperature T_K . The simplest molecular field approximation gives an excellent agreement with experimental data [1]. The study of spin kinetics also justifies the picture of localized f-electrons. We showed that the collective spin motion of quasi-localized f-electrons and wide-band conduction electrons is the main ingredients for understanding the electron spin resonance (ESR) signal existence in the heavy fermion compounds [2]. A common energy scale due to the Kondo effect regulates the temperature dependence of different kinetic coefficients and results in a mutual cancelation of their singular parts in a collective spin mode. The temperature and angular dependence of the ESR parameters agrees with experimental data on YbRh_2Si_2 and YbIr_2Si_2 [3-6].

- [1] A.S. Kutuzov, A.M. Skvortsova, S.I. Belov, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, I. Eremin, C. Krellner, C. Geibel, B.I. Kochelaev, *Magnetic susceptibility of YbRh_2Si_2 and YbIr_2Si_2 on the basis of a localized 4f electron approach*, J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 455208 (2008).
- [2] B.I. Kochelaev, S.I. Belov, A.M. Skvortsova, A.S. Kutuzov, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, C. Geibel, F. Steglich, *Why could electron spin resonance be observed in a heavy fermion Kondo lattice?* Eur. Phys. J. B. **72**, 485 (2009).
- [3] J. Sichelschmidt, V.A. Ivanshin, J. Ferstl, C. Geibel, F. Steglich, *Low temperature electron spin resonance of the Kondo ion in a heavy fermion metal: YbRh_2Si_2* , Phys. Rev. Lett. **91**, 156401 (2003).
- [4] J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, H-A. Krug von Nidda, J. Ferstl, C. Geibel, F. Steglich, *Spin dynamics of YbRh_2Si_2 observed by electron spin resonance*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 116204 (2007).
- [5] J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, H-A. Krug von Nidda, I.I. Fazlishanov, Z. Hossain, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich, *Electron spin resonance of YbIr_2Si_2 below the Kondo temperature*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 016211 (2007).
- [6] T. Gruner, J. Wykhoff, J. Sichelschmidt, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich, *Anisotropic electron spin resonance of YbIr_2Si_2* , J. Phys.: Condens. Matter **22**, 135602 (2010).

Kondo Effect in Heavy Fermion Compounds YbRh₂Si₂ and YbIr₂Si₂S.I. Belov, A.S. Kutuzov

Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya, 18, Kazan, Russia

e-mail: alexander.kutuzov@gmail.com

We present the investigation of the Kondo effect in the unusual behavior of the heavy fermion compounds YbRh₂Si₂ and YbIr₂Si₂. The discovery of electron spin resonance (ESR) in the Kondo lattice below the thermodynamically measured Kondo temperature $T_K = 25$ K was a great surprise for the condensed matter physics community [1]. According to the picture based on the one impurity Kondo problem, magnetic moments of Yb-ions are screened by the conduction electrons at $T < T_K$ and the ESR linewidth should not be observable. The experimental results were quiet opposite: at X-band (9.4GHz) and $T = 0.7$ K a linewidth of 0.3 GHz was observed. We propose a theoretical model which takes into account both Kondo effect in heavy fermion compounds and the local properties of Yb-ions in the crystal electric field. It was shown that the Kondo effect regulates the temperature dependence of different kinetic coefficients due to the common energy scale and results in the mutual cancelation of divergent parts in a collective spin mode. Besides, an importance of Kondo effect in the static magnetic susceptibility behavior is indicated by experimental data: Curie constant and Weiss temperature considerably differ for low and high temperature region. The theory based on the renormalization of the Kondo interaction due to the Kondo effect leads to the scaling corrections to the static magnetic susceptibility which results to the temperature dependent Curie and Weiss parameters. The predicted results well agree with experimental data on YbRh₂Si₂ and YbIr₂Si₂ [1-3] (some of our results were published in [4-5]).

- [1] J. Sichelschmidt, V.A. Ivanshin, J. Ferstl, C. Geibel, F. Steglich, *Low temperature electron spin resonance of the Kondo ion in a heavy fermion metal: YbRh₂Si₂*, Phys. Rev. Lett. **91**, 156401 (2003).
- [2] J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, H-A. Krug von Nidda, J. Ferstl, C. Geibel, F. Steglich, *Spin dynamics of YbRh₂Si₂ observed by electron spin resonance*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 116204 (2007).
- [3] J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, H-A. Krug von Nidda, I.I. Fazlishanov, Z. Hossain, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich, *Electron spin resonance of YbIr₂Si₂ below the Kondo temperature*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 016211 (2007).
- [4] A.S. Kutuzov, A.M. Skvortsova, S.I. Belov, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, I. Eremin, C. Krellner, C. Geibel, B.I. Kochelaev, *Magnetic susceptibility of YbRh₂Si₂ and YbIr₂Si₂ on the basis of a localized 4f electron approach*, J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 455208 (2008).
- [5] B.I. Kochelaev, S.I. Belov, A.M. Skvortsova, A.S. Kutuzov, J. Sichelschmidt, J. Wykhoff, C. Geibel, F. Steglich, *Why could electron spin resonance be observed in a heavy fermion Kondo lattice?* Eur. Phys. J. B. **72**, 485 (2009).

Low-Temperature Magnetization in YbMnO₃/LaAlO₃ HeterostructuresR.M. Eremina^{1,2}, Z. Seidov³, I.V. Yatsyk^{1,2}, T.P. Gavrilova^{1,2}, D.V. Mamedov¹,
I.I. Fazlizhanov^{1,2}, I.F. Gilmutdinov², V.I. Chichkov⁴, N.V. Andreev⁴¹E. K. Zavoisky Physical-Technical Institute RAS, 420029, Sibirsky tract, Kazan, Russia²Kazan Federal University, 420018, Kremlyovskaya St., Kazan, Russia³Institute of Physics, Azerbaijan National Academy of Sciences, AZ 1143, H. Cavid Avenue, Baku, Azerbaijan⁴National University of Science and Technology MISiS, 119991, Leninskiy pr., Moscow, Russiae-mail: REremina@yandex.ru

In the frame of this work, we studied the magnetic properties of orthorhombic YbMnO₃ (o-YbMnO₃) thin films of thickness 100, 150 and 250 nm deposited onto the dielectric LaAlO₃ substrate. We performed the measurements of the magnetization in the temperature range 1.9-300K under different values of the external magnetic field using the zero magnetic field cooling (ZFC) and the magnetic field cooling (FC) regime. The experimental data for 150 nm and 250 nm are shown in Fig.1. The absolute values of the FC and ZFC magnetization YbMnO₃/LaAlO₃ heterostructure depend on the thickness of the YbMnO₃ thin film (see Fig.1 a, c or Fig.1 b, d) and on the value of the external magnetic field (see Fig.1 a, b or Fig.1 c, d). At the same time the temperature of the splitting of the FC and ZFC magnetization and its absolute value does not depend on the value of the external magnetic field (especially at low temperatures) and slightly depend on the YbMnO₃ film thickness. This experimental fact is shown in detail in Fig.2.

The temperature of the splitting between ZFC and FC magnetizations usually corresponds to the ordering temperature in the sample. But in all cases (100, 150 and 250nm) the temperature of the splitting does not correspond to the ordering temperature of the bulk o-YbMnO₃ (40K) [1]. We suggested that the magnetic properties of the thin films depart from the bulk behavior due to the strain effects. In addition, the zero-fieldcool run shows a cusp at ~10 K under H=500 Oe (Fig.1 b, d). If the measurement is repeated under a higher field H=1kOe (Fig. 1 a, c), the cusp shift to lower temperatures. From these features the presence of competing ferromagnetic/antiferromagnetic interactions leading to a glassy behavior can be suggested.

At the same time, the strain effects alone cannot play the crucial role, because there is no high influence of the thickness of the YbMnO₃ thin film to the low-temperature behavior of the magnetization. Perhaps, the film morphology plays, instead, a crucial role, how it was in the case of o-YbMnO₃/SrTiO₃ [1]. Authors of [1] showed that in addition to be more strained ultrathin films also display a much flatter morphology, they found that in the case of rougher ultrathin films the magnetic behavior becomes Curie-Weiss type. This strongly indicates that the glassy behavior is related to a flatter morphology and shows that a more complex scenario than purely strain effects (involving surface or finite-size effects) should be taken into account [1]. Thus, the experiments on the magnetization should be completed by the investigations of the morphology and the roughness of the film surface for YbMnO₃/LaAlO₃ heterostructures.

This work was supported by the Science Development Foundation under the President of the Republic of Azerbaijan Grant № EIF-2013-9(15)-46/09/1

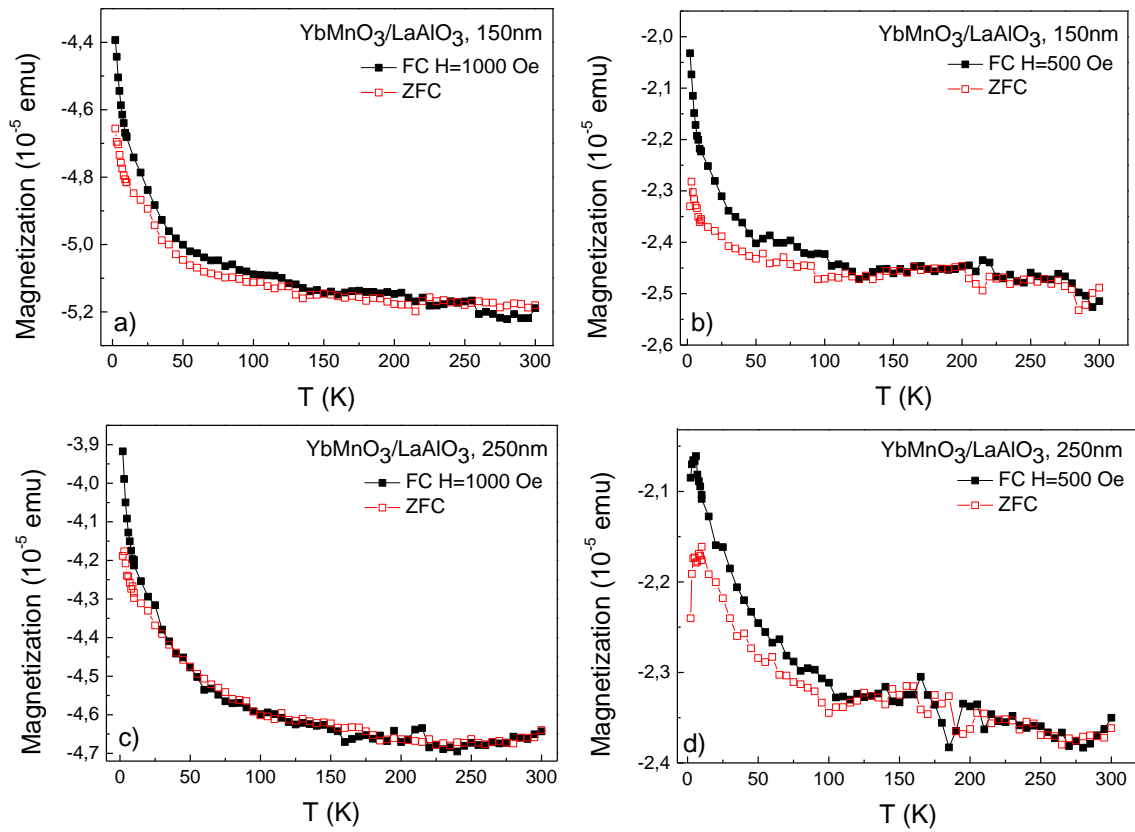


Fig.1. Temperature dependence of the magnetization of YbMnO₃/LaAlO₃ thin films at different values of the external magnetic field H=500 Oe and H=1000 Oe. The thickness of YbMnO₃ thin films: a), b) - 150 nm, c), d) - 250 nm.

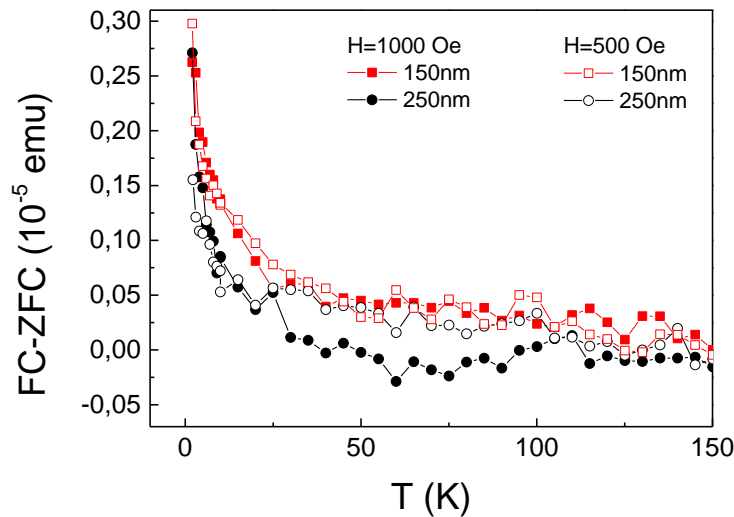


Fig.2. FC-ZFC magnetization splitting in YbMnO₃/LaAlO₃ heterostructure.

[1] D. Rubi, S. Venkatesan, B.J. Kooi, et al. Phys. Rev. B 78, 020408(R) (2008).

Magnetic Properties of Polycrystalline Cr₂O₃/ CoFe₂O₄ Multiferroic Films

Polyakova K.P.¹, Polyakov V.V.¹, Velikanov D.A.^{1,2}, Patrín G.S.^{1,2}

¹Kirensky Institute of Physics, Krasnoyarsk, Russia

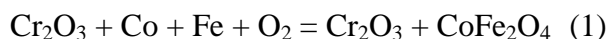
²Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia

e-mail : pkp@iph.krasn.ru

Of interest are composite multiferroics with the Cr₂O₃ antiferromagnet characterized by the magnetoelectric effect. As is known, the specific feature of the structures antiferromagnet-ferro(ferri)magnet is the unidirectional anisotropy and exchange bias. Under the action of an electric field, such structures reveal a number of intriguing phenomena offering new opportunities for application. In particular, in the Cr₂O₃/CoPt heterostructures, the bias field switching effect under the action of an electric field was found [1].

In this study, we investigate for the first time the magnetic properties of the layered Cr₂O₃/CoFe₂O₄ composite multiferroic structure.

The Cr₂O₃/CoFe₂O₄ film structure was formed as follows. The Cr₂O₃ films were prepared on a quartz substrate by the oxidation Cr layer in air at a temperature of 870 K. After that, the Co and Fe layers were deposited on the Cr₂O₃ film. The CoFe₂O₄ cobalt ferrite film was obtained by solid-state reaction (1) in the regime of self-propagating high-temperature synthesis with an initiation temperature of 620 K. It was shown that at this temperature, only the CoFe₂O₄ film form on Cr₂O₃ film.



To observe the exchange bias, we measured the magnetization reversal curves $M(H)$ upon cooling from the Neel temperature of Cr₂O₃ to 4 K. The samples were cooled in the zero field cooling (FZC) and 1-kOe-field cooling (FC) modes. The magnetic field was applied in the film plane along the chosen direction.

The magnetic measurements confirmed the existence of the exchange coupling in the Cr₂O₃/CoFeO₄ bilayer of different thicknesses. Figure 1 shows the hysteresis loops obtained using a SQUID magnetometer at a temperature of 4.2 K. The layer thickness were 80 nm (Cr₂O₃) and 150 nm (CoFeO₄). It can be seen that the curve shifts toward negative magnetic fields. The exchange bias field is 90 Oe. Temperature dependences of the magnetic moment at (FZC) and (FC) cooling make it possible to determine the Neel temperature of Cr₂O₃ layer (330 K).

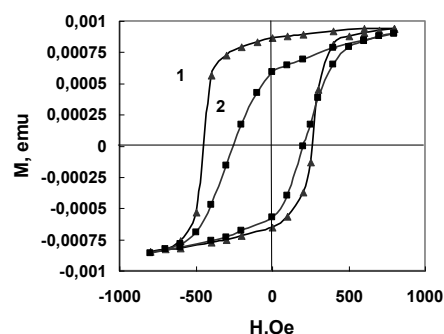


Fig. 1. FZC and FC hysteresis loops of the Cr₂O₃/CoFe₂O₄ multiferroic film.

[1] P. Borisov, A. Hochstrat., Xi. Chen., W. Killeman, Ch. Benik, Phys.Rev. Lett., 94 (2005) 117203-117206.

[2] K.P. Polyakova, V.V. Polyakov, V.A. Seredkin, G.S. Patrín, Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki 37 (2011) 30-35.

High Field Copper NMR Study of CuCrO₂

Sakhratov Yu.A.^{1,2}, Svistov L.E.^{1,3}, Kuhns P.L.¹, Zhou H.D.^{1,4}, and Reyes A.P.¹

¹ National High Magnetic Field Laboratory, Tallahassee, Florida 32310, USA

² Kazan State Power Engineering University, 420066 Kazan, Russia

³ P. L. Kapitza Institute for Physical Problems RAS, 119334 Moscow, Russia

⁴ Department of Physics and Astronomy, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996, USA

e-mail: sakhratov@gmail.com

We performed Cu NMR spectra measurements in single crystal of a triangular-lattice antiferromagnet CuCrO₂ in magnetic fields up to 30 T. Measurements in the fields below 15.5 T were reported previously [1].

Fig.1 shows representatives of ⁶³Cu NMR spectra at different fields; all spectra are shifted by the value of $\mu_0 H_0$, where H_0 is the resonance field of the central peculiarity, so that their centers have the same position. At low field range ($\mu_0 H < \sim 11$ T) the spectra have two horns similar to those observed for $\mathbf{H} \parallel ab$ -plane, see [1]. For higher fields, an additional third peak appears in the middle of the spectra. This peak continues to grow up to ~ 20 T and then up to 30 T the spectra shape remains almost unchanged.

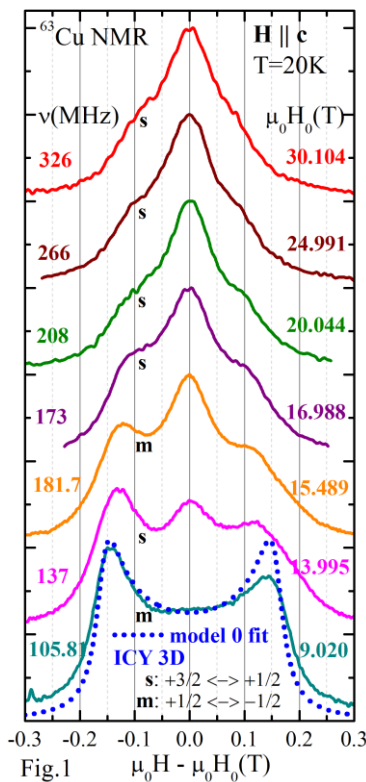


Fig.1

The results are discussed in the framework of planar magnetic structure proposed in [2]. Parallel field data for the fields lower than 11 T can be satisfactorily described by the model of incommensurate (IC) spiral spin structure with 3D order, Fig.1, model 0. The data for higher fields indicate field evolution of the magnetic structure. Taking into account strong two-dimensionality of CuCrO₂ the most natural models for high field magnetic phases are: 1) commensurate (C) spiral magnetic structure with 3D order; 2) C spiral magnetic structure with 2D order; 3) IC spiral magnetic structure with 2D order. Computed spectra are shown in

Fig.2. Only the third model satisfactorily describes the spectrum.

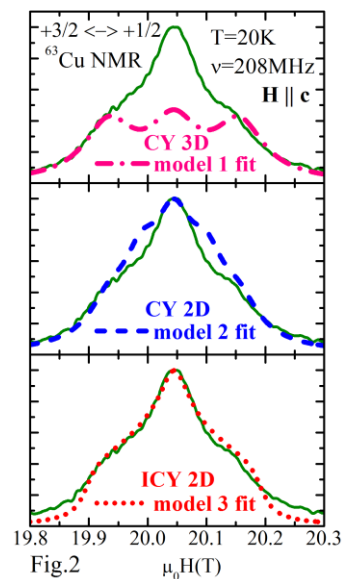


Fig.2

Fig.2. Only the third model satisfactorily describes the spectrum.

The high field magnetic phase diagram of CuCrO₂ was studied by electric polarization with pulse technique in [3] and the phases were identified and labeled in [4]. NMR confirmed the existence of ICY and ICU phases for $\mathbf{H} \perp \mathbf{c}$, see [1]. For $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$ the phase transition from ICY to CY phase in [3, 4] according to NMR is associated with transition from 3D to 2D state of ICY phase.

[1] Yu.A. Sakhratov et al., *JETP***119** (5), 880 (2014).

[2] M. Frontzek et al., *J. Phys.: Condens. Matter***24**, 016004 (2012).

[3] Eundeok Mun et al., *Phys. Rev.* **B89**, 054411 (2014).

[4] Shi-Zeng Lin et al., *Phys. Rev.* **B89**, 220405(R) (2014).

Magnetocaloric Effect in $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ Film

R. Szymczak¹, K. Dyakonov², I. Radelytskyi¹

¹ Institute of Physics, 02-668, Al. Lotników 32/46, Warsaw, Poland

² Ioffe Institute, 194021, 26 Politekhnicheskaya, St. Petersburg, Russia

e-mail: k.dyakonov@mail.ioffe.ru

Lanthanum-strontium-manganite film, 150 nm thick, was grown on the YZ-cut optically polished piezodielectric LiNbO_3 substrate by pulsed laser-deposition technique with the use of $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ stoichiometric ceramics as a target. X-ray diffraction data show that the film is single phase, epitaxial and (211) oriented with the pseudocubic lattice parameter $a = 0.3853$ nm. The measurements of magnetization as a function of magnetic field and temperature were carried out by a 7 T SQUID magnetometer. From the temperature dependence of magnetization, the Curie temperature determined is equal to 239 K (Fig.1). The total magnetic entropy change of the magnetic system is equal to $\Delta S_M = 1.2 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ for a field change of 20 kOe (Fig.2). The obtained results indicate that the magnetocaloric effect in the thin film at 20 kOe is equal to be about 50% of ΔS_M determined for bulk counterpart. This reduction of MCE can be attributed to the special environments of the surface and interface atoms and also as a result of the strain which is induced by the substrate. A reasonably high magnetocaloric effect indicates that this film might provide an efficient material for micro magnetic refrigerators.

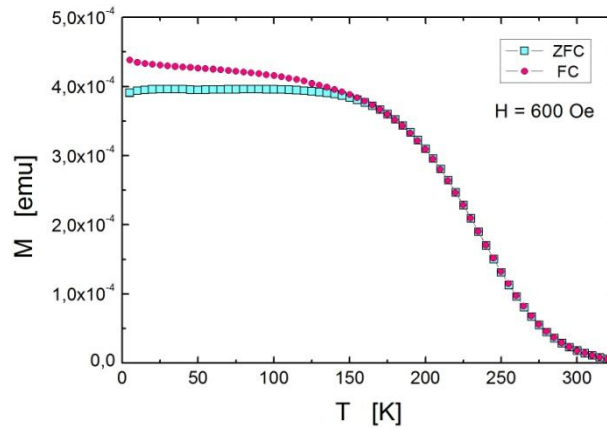


Fig.1. Temperature dependence of magnetization for the $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ sample for zero field cooling (ZFC) and field cooling (FC) regimes.

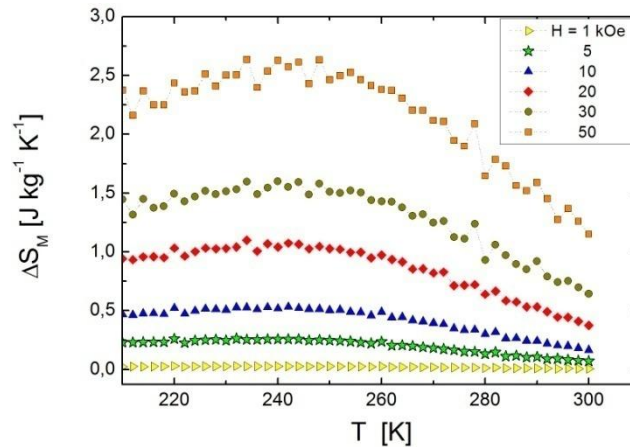


Fig.2. Magnetic entropy change as a function of temperature.

Study of Magnetism of the Iridium Double Perovskite $\text{La}_2\text{CoIrO}_6$

E.L. Vavilova^{1,2}, M.F. Iakovleva^{1,2}, H.-J. Grafe², T. Dey², V.E. Kataev^{1,2}, B. Buechner²

¹Zavoiskii KPhTI, 420029, Sibirskii trakt 10/7, Kazan, Russia

²IFW–Dresden, 01069, Helmholtzstraße 20, Dresden, Germany

e-mail: jenia.vavilova@gmail.com

$\text{La}_2\text{CoIrO}_6$ is a new member of class of double perovskites $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$, where B and B' are d-transition metal. These compounds have attracted considerable attention in recent years because of rich variety of the properties such as a high Curie temperature, a high magnetoresistance, a metal-insulator transition, and half-metals. X-ray magnetic circular dichroism study shows that in $\text{La}_2\text{CoIrO}_6$, Ir^{4+} couples antiferromagnetically to the weak ferromagnetic moment of the canted Co^{2+} sublattice and shows an unusually large negative total magnetic moment ($-0.38 \mu_B/\text{f.u.}$) combined with strong spin-orbit interaction [1].

We present the first results of the investigations of the bulk (static susceptibility) and local (^{139}La NMR) properties of the powder sample of $\text{La}_2\text{CoIrO}_6$. It was found that the magnetic order occurs at $T=105$ K. The susceptibility above 105 K cannot be fitted by simple Curie-law suggesting the complicated character of interactions of two magnetic sublattices. The deviation of the NMR lineshift and linewidth from the susceptibility temperature dependence reveals that mostly one of the magnetic sublattices determines the local fields on the La positions. Therefore, the NMR seems to be a sensitive probe of studying an intrinsic magnetism of $\text{La}_2\text{CoIrO}_6$.

[1] A. Kolchinskaya et.al., Phys. Rev. B 85, 224422 (2012).

Low-Temperature Magnetic Properties of Dy-Containing Clusters

V.K. Voronkova¹, A.A. Sukhanov¹, A. Baniodeh², A.K. Powell², L. Ungur³, L.F. Chibotaru³

¹Zavoisky Physical-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, 420029 Kazan, Russia

²Karlsruhe Institute of Technology, University of Karlsruhe, D-76131, Karlsruhe, Germany

³Division of Quantum and Physical Chemistry Katholieke Universiteit Leuven, 3001, Leuven, Belgium

e-mail: vio@kfti.knc.ru

The design, synthesis, and magnetic investigations of single molecule-magnets (SMMs) have attracted widespread attention in the past two decades because each individual molecule of SMMs can act as a single-domain nanomagnet at a certain blocking temperature in the absence of an external magnetic field, retaining its magnetization once magnetized. SMMs can be used for applications involving the storage and processing of digital information. The molecular nature of SMMs offers unique attributes that may allow information to be stored with high density [1]. However, SMM-based technology can be realized only at high blocking temperatures.

It is expected that the clusters containing highly anisotropic Dy ions are promising for creation of new single molecule magnets with improved parameters. The SMM behavior of these clusters is due to the strong magnetic anisotropy which is characteristic for dysprosium ions in the low-symmetry environment at low temperature. The design of new SMMs on the basis of clusters with dysprosium ions requires the understanding of the correlation between the relaxation rate of the magnetization, anisotropy of the local magnetic properties of the Dy³⁺ ion and spin-spin interactions in cluster. EPR is a useful method for investigations of the local magnetic properties of the paramagnetic ions and spin-spin interaction between ions in clusters.

The study of a family of Fe₂Dy₂ clusters in the [Fe₂Dy₂(OH)₂(teaH)₂(R-C₆H₄COO)₆] compounds with different substituted benzoate ligands showed that the nature and position of the substituents affect the SMMs properties [2,3]. In this report we present the results of EPR studies of this family of compounds and other close on the composition of compounds built up of tetranuclear Fe₂Dy₂ clusters at different temperatures down to 4 K and frequencies (X- and Q-band) supported by magnetic measurements of the direct current (dc) and alternating current (ac) magnetic susceptibilities and *ab initio* calculations of g-tensors and orientations of the local magnetic axes of monomeric subunits. The reason for the change of SMM properties and character of influence of the spin-spin interactions on these properties are discussed.

This research is supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 13-02-01157).

[1] Leuenberger, M. N.; Loss, D. *Nature* 2001, **410**, 789.

[2] V. Mereacre, A. Baniodeh, C.E. Anson, A.K. Powell, *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, **133**, 15335.

[3] A. Baniodeh, V. Mereacre, Y. Lan, J.A. Wolny, Ch.E. Anson, V. Schünemann, A.K. Powell, *Chem. Comm.*, 2013, **49**, 9666.

Температурное поведение гистерезисных и магниторезистивных свойств пленок типа $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb-Co}$

О.А. Аданакова, К.Г. Балымов, Н.А. Кулеш, В.О. Васьковский

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620000, пр-т Ленина, Екатеринбург, Россия

e-mail: adanakova@yandex.ru

Тонкие магнитные пленки, содержащие обменно-связанные слои ферромагнетика $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ и ферримагнетика Tb-Co, вследствие ряда физических свойств могут найти практическое применение в разного рода магнитно-чувствительных устройствах. Пермаллой в таких средах используется как материал со значительным анизотропным магнитосопротивлением. Слою аморфного ферримагнетика Tb-Co принадлежит роль источника формирования в ферромагнитном (функциональном) слое однонаправленной анизотропии. Целью настоящей работы стало изучение влияния температуры на поле обменного смещения и магнитосопротивление обозначенных пленочных структур. Помимо образцов $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb-Co}$, в исследовании рассматривались системы с тонкой немагнитной прослойкой Ti, а также с селективно отожженным слоем $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$.

Пленочные образцы были получены методом высокочастотного ионно-плазменного распыления мозаичных мишеней соответствующего состава. В качестве подложек использовались покровные стекла Corning. Толщины слоев $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ и Tb-Co составили 50 и 110 нм соответственно, для образцов $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Ti}/\text{Tb-Co}$ номинальная толщина Ti была равна 0,7 нм [1]. Селективный отжиг слоя пермаллоя проводился в вакуумной камере (остаточное давление ниже 0,1 мПа) в едином цикле осаждения/термообработки. Для индуцирования анизотропии в плоскости образцов все пленки осаждались в присутствии внешнего магнитного поля 150 Э, ориентированного параллельно поверхности подложки. Концентрация Tb в ферримагнитных слоях Tb-Co соответствовала 26-30 ат.%, что обеспечивало относительно высокую температуру Нееля и преобладание намагниченности тербиевой подрешетки. Элементный состав контролировался методом рентгенофлуоресцентного анализа на спектрометре Nanohunter. Для измерений магнитных и магниторезистивных свойств использовались SQUID (MPMS XL7 EC) и VSM (LakeShore) магнитометры.

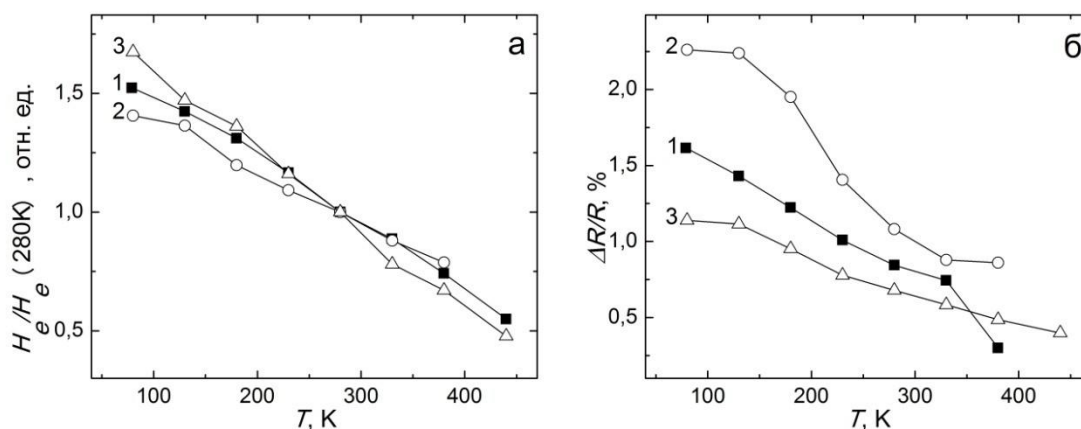


Рис. 1 Температурные зависимости H_e (а) (нормировано по H_e при 280 К) и $\Delta R/R$ (б) образцов: 1 - $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Tb-Co}$, 2 - $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$ (селективно отожжен)/Tb-Co, 3 - $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}/\text{Ti}/\text{Tb-Co}$

Анализ петель гистерезиса $M(H)$, полученных для разных значений температуры $T = 78\div 440$ К, позволил определить зависимости поля магнитного смещения H_e и магнитосопротивления $\Delta R/R$ функциональных слоев ($\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$) от температуры T (рис. 1). Видно, что во всех случаях значение H_e монотонно уменьшается с увеличением T (рис. 1а), причем такое поведение имеет практически линейный характер со значительным снижением в области высоких температур. Согласно Маури и др. [2], при более высоких T и меньшей магнитной анизотропии Tb-Co интерфейсная доменная стенка должна проникать в ферромагнитный слой, что приводит к связи между свойствами Tb-Co и H_e . Таким образом, снижение H_e при высоких значениях температуры является следствием уменьшения магнитной анизотропии и намагниченности слоя Tb-Co. Однако, в нашем случае введение немагнитной прослойки Ti не привело к заметным изменениям в поведении зависимости $H_e(T)$, что может означать сохранение прямого обмена через несплошную прослойку Ti или же незначительное влияние проникновения доменной стенки в ферромагнитный слой.

Относительно малый эффект анизотропного магнитосопротивления (рис. 1б), наблюдаемый на образцах, может быть объяснен шунтирующим эффектом слоя Tb-Co и нанокристаллическим состоянием пермаллоя. Селективный отжиг слоя $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$, ставший причиной его рекристаллизации, привел к увеличению магниторезистивного отношения $\Delta R/R$. Нелинейность, наблюдаемая в области низких температур, связана с возможной абсорбцией остаточных газов в процессе термообработки и, как следствие, с неоднородностью намагниченности слоя $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{80}$. Температурные зависимости $\Delta R/R$ других образцов, как и ожидалось, продемонстрировали линейное поведение.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, проект №1362.

[1] Kulesh N.A., Balymov K.G., Sorokin A.N., Vas'kovskiy V.O., Solid St. Phenomena 190, 451 (2012).

[2] Mauri D., Siegmann H.C., Bagus P.S., Kay E., J. Appl. Phys. 62 (7), 3047 (1987).

Суперсверхтонкая структура спектров ЭПР в системе $\text{LiYF}_4:\text{Nd}^{3+}$, обогащенной изотопами ^{143}Nd

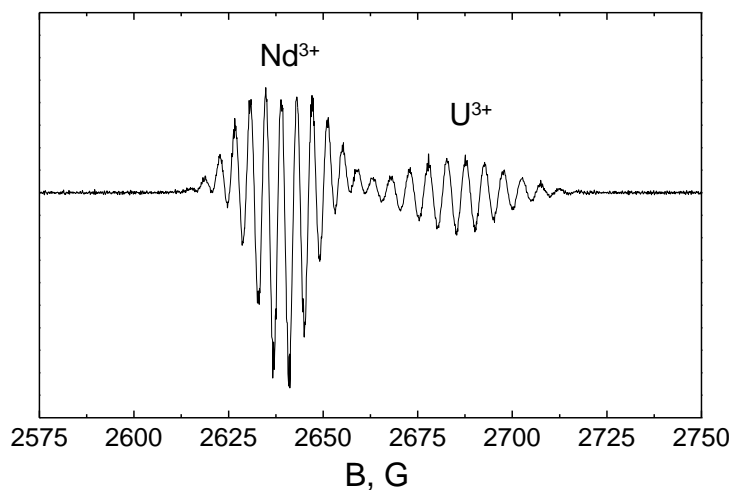
Л.К. Аминов, М.Р. Гафуров, С.Л. Кораблева, И.Н. Куркин, А.А. Родионов

Казанский федеральный университет, 420008, ул. Кремлевская 18, Казань, Россия

e-mail: igor.kurkin@ksu.ru

Настоящая работа представляет собой продолжение серии исследований спектров ЭПР трехвалентных редкоземельных ионов RE^{3+} , внедренных в монокристаллы двойных фторидов LiRF_4 в позиции матричных ионов $\text{R} = \text{Y}, \text{Lu}, \text{Tm}$. Подробный обзор предыдущих работ по этой теме вместе с деталями теоретического анализа спектров был приведен в нашей работе [1]. В данной работе мы приводим результаты исследований спектров ЭПР систем $\text{LiYF}_4:\text{Nd}^{3+}$, обогащенных изотопами ^{143}Nd с ядерным спином $I = 7/2$. Система $\text{LiYF}_4:\text{Nd}^{3+}$ интересна тем, что в ней впервые наблюдалось проявление суперсверхтонкого взаимодействия в оптических спектрах [2]. Суперсверхтонкое расщепление спектров ЭПР в такой системе ранее наблюдалось лишь при ориентации магнитного поля \mathbf{B} вдоль оси симметрии кристалла [3]. На образцах, исследованных в настоящей работе, удалось наблюдать это расщепление и при ориентации $\mathbf{B} \perp c$, причем на линиях, относящихся как к изотопам ^{143}Nd , так и к четным изотопам.

Монокристаллы LiYF_4 , активированные ионами неодима и урана, выращивались методом Бриджмена в графитовых тиглях, в атмосфере особо чистого аргона. Примесь изотопа неодима вводилась в виде соответствующего оксида в количестве ≈ 0.01 ат.%, урана - в виде фторида UF_3 в количестве ≈ 0.01 ат.%



На рисунке приведен спектр ЭПР (вторая производная) образца $\text{LiYF}_4:^{143}\text{Nd}_2\text{O}_3:\text{UF}_3$ в ориентации $\mathbf{B} \perp c$. Спектр ЭПР регистрировался стационарным методом в X-диапазоне (≈ 9.4 ГГц) на спектрометре ESP-300 фирмы Bruker при температурах $T \approx (5-15)$ К.

Наблюдается четко разрешенная суперсверхтонкая структура (ССТС) как на ионах Nd^{3+} , так и на ионах U^{3+} . Интервалы между компонентами ССТС для Nd^{3+} равны 4.0 Гс (14.3 МГц), а для ионов U^{3+} они равны 5.1 Гс (17.9 МГц).

Ранее нами были выполнены измерения ССТС ионов Nd^{3+} и U^{3+} в монокристаллах LiYF_4 при ориентации внешнего магнитного поля $\mathbf{B}||c$. Было получено, что для Nd^{3+} компоненты ССТС разделены интервалами 5.5 Гс (15.4 МГц), а для U^{3+} интервалы 14.9 Гс (24.0 МГц). Таким образом, для изоэлектронных ионов Nd^{3+} ($4f^3$) и U^{3+} ($5f^3$) суперсверхтонкое взаимодействие иона группы актиноидов заметно больше, чем для иона группы лантаноидов.

Высокая концентрация изотопа ^{143}Nd позволила наблюдать ССТС на отдельных компонентах сверхтонкой структуры (СТС) $^{143}\text{Nd}^{3+}$. Получен существенный результат: константа ССТС увеличивается при увеличении магнитного поля (т.е. при переходе от слабополевой компоненты СТС к сильнополевой), что предположительно связано с ядерным зеемановским взаимодействием ядра ^{19}F .

- [1] Л.К. Аминов, И.Н. Куркин, Б.З. Малкин. ФТТ **55**, 1249 (2013).
- [2] R.M. Macfarlane, R.S. Meltzer, B.Z. Malkin. Phys Rev B **58**, 5692 (1998).
- [3] Л.К. Аминов, А.А. Ершова, С.Л. Кораблева, И.Н. Куркин, Б.З. Малкин, А.А. Родионов. ФТТ **53**, 2129 (2011).

Термодинамические свойства франциситов $\text{Cu}_3\text{Ln}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Lu}$)

П.С. Бердонос¹, Е.С. Кузнецова¹, К.В. Захаров¹, А.Н. Васильев^{1,2,3}

¹Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119991, Ленинские горы, д. 1, Москва, Российская Федерация

²Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, 620002, ул. Мира, д. 19, Екатеринбург, Российская Федерация

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», 119049, Ленинский проспект, д. 4, Москва, Российская Федерация

e-mail: zak-konstantin@yandex.ru

Франциситы $\text{Cu}_3\text{Ln}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Lu}$) с орторомбической структурой (пространственная группа симметрии $Pmmn$) представляют собой новый класс слоистых соединений. Носители магнитного момента – ионы Cu^{2+} – формируют искаженную решетку кагоме внутри каждого слоя [1], что приводит к фрустрации магнитных обменных взаимодействий.

Было обнаружено, что подобно исследуемому ранее франциситу $\text{Cu}_3\text{Y}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ [2] на температурных зависимостях магнитной восприимчивости $\text{Cu}_3\text{Ln}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Lu}$) (рис. 1) наблюдается острый пик при температуре Нееля $T_N = 36$ К и 38 К соответственно для образцов с Eu и Lu. Эта аномалия связана с антиферромагнитным упорядочением в подсистеме переходного металла. Фазовый переход подтверждается также измерениями температурных зависимостей теплоемкости (рис. 2), при этом уже в небольших магнитных полях ~ 4 Т переход подавляется.

На полевых зависимостях намагниченности $\text{Cu}_3\text{Ln}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Lu}$) в небольших полях 2.4 Т и 2.5 Т соответственно происходит ярко выраженный метамагнитный переход при температурах ниже T_N (рис. 3).

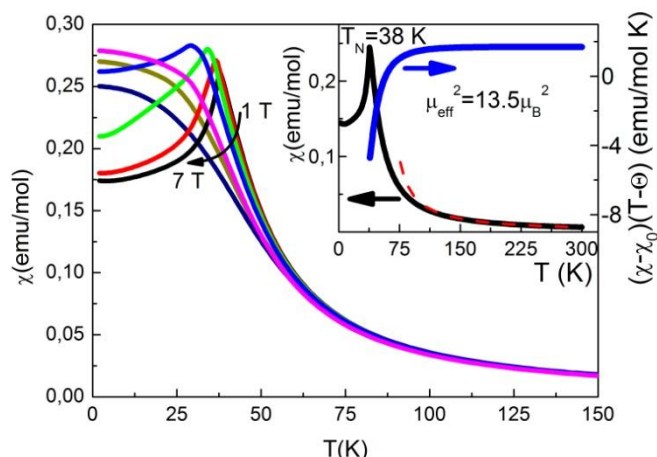


Рис. 1. Температурные зависимости магнитной восприимчивости $\text{Cu}_3\text{Lu}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ в магнитных полях 1-7 Т. На вставке температурная зависимость магнитной восприимчивости в поле 0.1 Т. Красная линия – закон Кюри-Вейсса. Синяя – температурная зависимость константы Кюри.

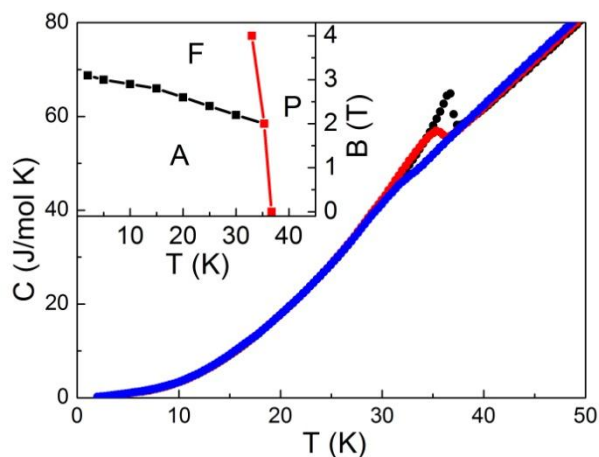


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости $\text{Cu}_3\text{Lu}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$. Черная кривая при отсутствии магнитного поля, красная и синяя в магнитных полях 2 Т и 4 Т соответственно. На вставке представлена магнитная фазовая диаграмма $\text{Cu}_3\text{Lu}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$.

В результате были получены магнитные фазовые диаграммы на основании измерений полевых зависимостей намагниченности при разных температурах и температурных зависимостей теплоемкости в магнитных полях. Магнитная фазовая диаграмма для $\text{Cu}_3\text{Lu}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ приведена на вставке к рис. 2. Черные точки соответствуют метамагнитному переходу на полевых зависимостях намагниченности. Красные – температуры Нееля.

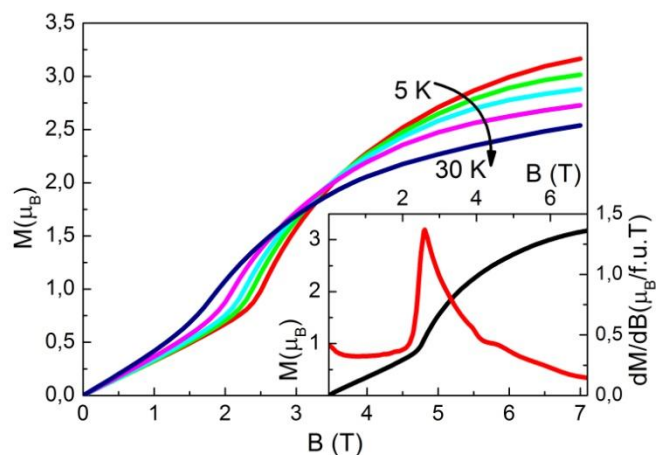


Рис. 3. Полевые зависимости намагниченности $\text{Cu}_3\text{Eu}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{Cl}$ при температурах 5-30 К. На вставке представлена полевая зависимость при температуре 2 К, а также ее первая производная (красная линия).

- [1] P.S. Berdonosov and V.A. Dolgikh, *Russ. J. of Inorg. Chem.* **53**, 9, 1353 (2008).
 [2] K. Zakharov, E. Zvereva, P. Berdonosov, E. Kuznetsova, V. Dolgikh, L. Clark, C. Black, P. Lightfoot, W. Kockelmann, Z. Pchelkina, S. Streltsov, O. Volkova, and A. Vasiliev, *Phys. Rev. B* **90**, 214417 (2014).

Спиновые переходы и магнитный порядок

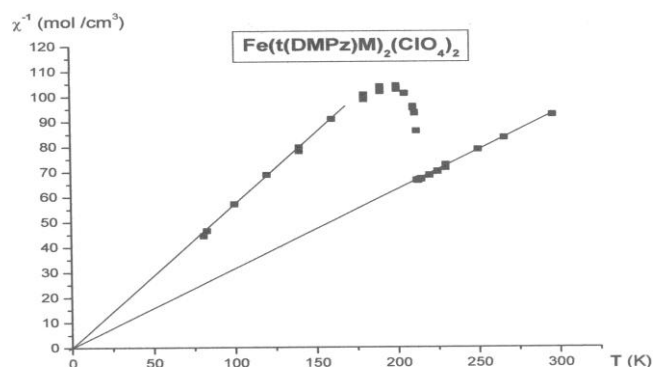
Л.А. Боярский

Новосибирский госуниверситет, ул. Пирогова, 2, 630090, Новосибирск, Россия

e-mail: boyarskij33@mail.ru

Упорядочение спинов при заполнении электронных оболочек переходных элементов (правила Хунда) выполняется в достаточно симметричных твердых телах (кубической или октаэдрической координации). В более сложных случаях, например в металлоорганических соединениях, возникают фазовые переходы из низкоспиновых, противоречащих правилам, в высокоспиновые, отвечающие правилам, состояния. В ряде случаев существуют и промежуточные состояния. При изменении давления, температуры или под действием электромагнитного излучения некоторые соединения переходных $3d^n$ -металлов ($4 \leq n \leq 7$) испытывают изменение магнитного момента при переходе между упомянутыми состояниями. Как правило, имеет место температурный гистерезис, т. е. происходит фазовый переход первого рода.

Эти превращения наблюдаются, например, в качестве «побочного» эффекта при изучении магнитоупорядоченных состояний в упомянутых металлоорганических соединениях. Цель их исследований заключается, как правило, в поиске новых ферромагнитных материалов с низкой плотностью и высокими значениями точек Кюри и магнитных моментов насыщения. Поэтому, когда в результате синтеза не получаются соединения, обладающие магнитоупорядоченной фазой, эксперимент считается неудачным. Однако, если при этом наблюдаются спиновые переходы, то возникает возможность изучения этого явления «в чистом виде». На рисунке представлены результаты измерения магнитной восприимчивости одного из таких соединений [1].

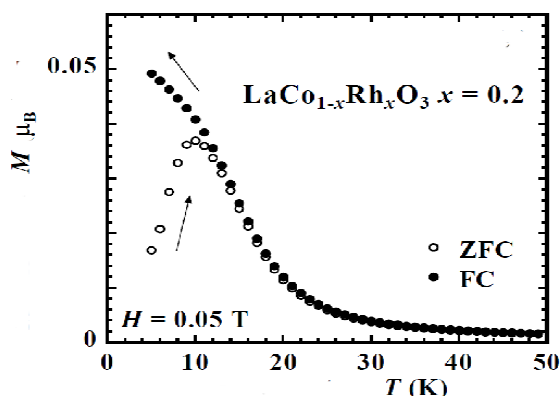


Отчетливо виден фазовый переход, при этом характерно, что оба состояния остаются чисто парамагнитными (обе кривые экстраполируются в начало координат). Измерения магнитного момента показали, что при низких температурах образец находился не в низкоспиновом, а в промежуточном состоянии.

Для того чтобы проследить, как возникает дальний магнитный порядок в связи со спиновым переходом, можно обратиться к более простым объектам исследования, например, к квазибинарной системе $\text{LaCo}_{1-x}\text{Rh}_x\text{O}_3$ [2]. Исходные компоненты LaCoO_3 и LaRhO_3 при низких температурах находятся в низкоспиновых состояниях, т. е. они немагнитны.

Спиновое состояние иона Co^{3+} в перовскитном кристалле лантан-кобальт изменяется с температурой и давлением. Ион Co^{3+} ($3d^6$) окружен шестью октаэдрически координированными ионами кислорода. Основное состояние трехвалентного иона кобальта в лантановом перовските ниже 100 К – низкоспиновое. Однако, как показано в разных теоретических и экспериментальных работах, имеют место также возбужденные состояния.

При повышении температуры решетка становится орторомбической, а ионы кобальта переходят в высокоспиновое состояние. Взаимодействие между этими ионами при этом оказывается недостаточным для возникновения магнитоупорядоченной структуры. Добавление ионов родия приводит к изменению группы симметрии в неупорядоченном твердом растворе. Это, в соответствии с представлениями Дзялошинского и Мориа, приводит к возникновению дополнительного обменного поля, что и становится причиной наблюдаемой на опыте фазы спинового стекла.



- [1] Боярский Л.А. Физика сильно коррелированных систем. Сверхпроводники и магнетики // Palmarium Academic Publishing, BRD, 2014. 58 p.
- [2] Asai S., Furuta N, et al. Weak ferromagnetism in $\text{LaCo}_{1-x}\text{Rh}_x\text{O}_3$: anomalous magnetism emerging between two nonmagnetic end phases. // ArXiv 2011. Cond-mat. 1107.4840. 16 p.

Синтез монокристаллов натриевых кобальтатов Na_xCoO_2 с $x = 0.5-0.8$

И.Ф. Гильмутдинов, И.Р. Мухамедшин

Институт физики Казанского федерального университета, 420008, Казань, Россия

e-mail: Idar.Gilmutdinov@gmail.com

Кристаллическая структура натриевых кобальтатов Na_xCoO_2 состоит из слоев оксида кобальта чередующихся слоями ионов натрия. Благодаря ионной проводимости, содержание натрия в данном соединении может меняться в широком диапазоне, не приводя к необратимым структурным изменениям кристаллической решетки. При этом их физические свойства меняются существенно, и они привлекают интерес благодаря большому коэффициенту термо-ЭДС, сверхпроводимости и эффектам, связанным с сильными электронными корреляциями.

В данной работе представлен метод синтеза монокристаллов натриевого кобальтата Na_xCoO_2 с содержанием натрия $x=0.5-0.8$. Для роста кристаллов Na_xCoO_2 с $x \sim 0.8$ использовался метод зонной плавки с оптическим нагревом. На рис.1а представлена фотография одного из выращенных кристаллов. Процедура роста подробно описана в работе [1]. Рост фаз с меньшим содержанием натрия сопровождается активным испарением натрия из зоны расплава, приводящим к нарушению состава, поэтому нами был применен электрохимический метод синтеза кристаллов с $x < 0.8$. Для этих целей был разработан цифровой потенциостат/гальваностат и собрана электрохимическая ячейка. Для подтверждения изменения содержания натрия в кристалле мы использовали метод рентгеновской дифракции, так как изменение содержания натрия влияет на размер элементарной ячейки. На рис.1в приведен участок дифрактограммы для полученных нами образцов Na_xCoO_2 с содержанием натрия $x=0.5, 0.66, 0.77$.

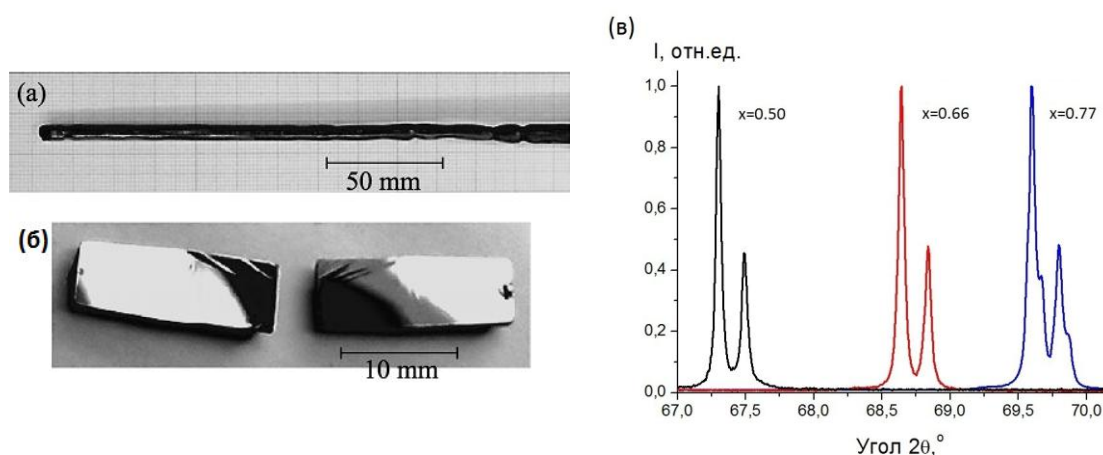


Рис.1. а) фотография выращенного кристалла $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$;
б) скол кристалла $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$ вдоль плоскости спайности ab ;
в) дифрактограмма кристаллов Na_xCoO_2 с различным содержанием натрия.

Работа выполнена в рамках программы повышения конкурентоспособности КФУ и при частичной финансовой поддержке РФФИ №14-02-01213а.

[1] И.Р. Мухамедшин, И.Ф. Гильмутдинов, М.А. Салосин, А. Аллул. Письма в ЖЭТФ, 2014, 99, 542-546.

Обнаружение сильного влияния вариаций состава на низкотемпературное магнитное упорядочение почти стехиометрических сплавов Fe–V–Al

Т.Е. Говоркова, А.Т. Лончаков, В.В. Марченков, С.М. Подгорных, В.И. Окулов,
В.С. Гавико, С.М. Емельянова

Институт физики металлов УрО РАН, 620990, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, Россия

e-mail: govorkova@imp.uran.ru

Сплавы железо-ванадий-алюминий с составами, близкими к стехиометрическому, могут быть отнесены к объектам спинтроники благодаря возможности одновременной реализации в этих материалах полупроводниковых свойств и спиновой поляризации носителей заряда. В связи с этим представляет интерес детальное изучение магнетизма данных сплавов в зависимости от их состава. Такого рода работы проводились в основном лишь для составов, обогащенных железом или ванадием [1,2]. В настоящей работе выполнены экспериментальные исследования низкотемпературных магнитных свойств сплавов Fe-V-Al с изменением содержания около стехиометрического состава не только атомов переходных элементов, но и атомов алюминия. При этом обнаружено значительное влияние небольших изменений состава на возникновение магнитного упорядочения.

Образцы сплавов Fe-V-Al были выплавлены в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона с трехкратным переплавом для получения лучшей однородности и охлаждены вместе с печью. Химический состав и однородность образцов определялись методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии с точностью $\sim 1\%$. По результатам анализа были отобраны следующие образцы: (1) – $\text{Fe}_{2.21}\text{V}_{0.92}\text{Al}_{0.87}$, (2) – $\text{Fe}_{1.99}\text{V}_{0.89}\text{Al}_{1.12}$, (3) – $\text{Fe}_{1.87}\text{V}_{1.1}\text{Al}_{1.03}$, (4) – $\text{Fe}_{1.76}\text{V}_{1.19}\text{Al}_{1.05}$. Рентгеноструктурные исследования показали, что все сплавы являются однофазными и обладают упорядоченной структурой по типу L2_1 .

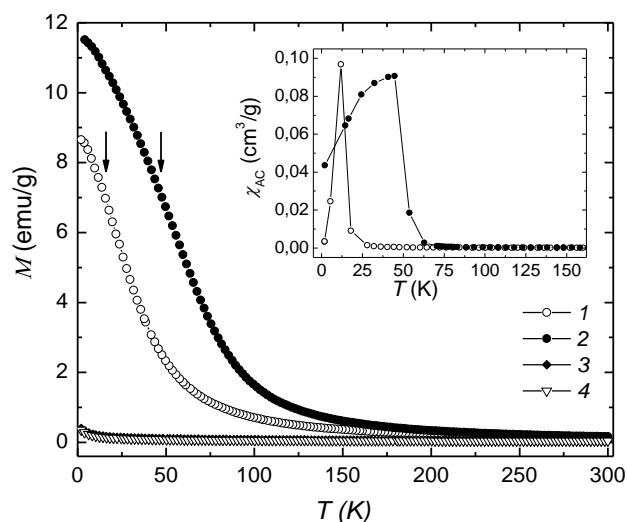


Рис. 1. Температурные зависимости удельной намагниченности в поле $H = 10$ кЭ для образцов 1 - 4 (номера образцов указаны рядом с символами). Стрелками отмечена температура Кюри. На вставке: температурные зависимости начальной магнитной восприимчивости χ_{AC} для образцов 1 и 2.

Зависимости намагниченности от температуры и магнитного поля, а также начальную магнитную восприимчивость $\chi_{AC}(T)$ измеряли на СКВИД-магнитометре MPMS-5XL (Quantum Design) в Центре коллективного пользования ИФМ УрО РАН.

Температурные зависимости удельной намагниченности $M(T)$ и $\chi_{AC}(T)$ для образцов 1 – 4 представлены на рис.1. На кривых $\chi_{AC}(T)$ для образцов 1 (обогащенный по железу) и 2 (обогащенный по алюминию) наблюдаются пики вблизи температур 12К и 50К, которые связаны с магнитным переходом из парамагнитного состояния в ферромагнитное. Для образца 1 этот переход можно также наблюдать на полевой зависимости $M(H)$ (рис. 2, кривые 1 для $T = 25$ и 2К). Также на этом образце при $T = 2$ К в намагниченности выявлена петля гистерезиса с заметной коэрцитивной силой ~ 100 Э, превышающей величину аппаратного гистерезиса. Температурные зависимости намагниченности обогащенных по ванадию образцов 3 и 4 демонстрируют парамагнетизм (рис. 1, кривые 3, 4; вставка к рис. 2).

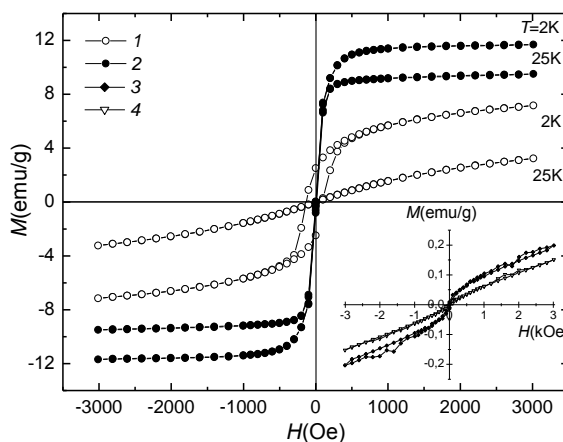


Рис.2. Магнитопольные зависимости удельной намагниченности $M(H)$ при фиксированных температурах для образцов 1,2. На вставке: зависимость $M(H)$ для образцов 3 и 4 при $T = 2$ К.

Согласно [1], для сплава $\text{Fe}_{2.2}\text{V}_{0.8}\text{Al}$ температура Кюри $T_C \approx 100$ К. Наши данные демонстрируют уменьшение T_C для образца 1 с таким же содержанием железа, поскольку из-за дефицита Al в этом образце часть атомов Fe ($\sim 10\%$) занимают немагнитные (тетраэдрические) положения атомов Al. Наиболее важный результат исследования – обнаружение ферромагнитного упорядочения с относительно высокой (~ 60 К) температурой Кюри для образца 2, в котором немагнитные атомы Al ($\sim 10\%$) замещают в решетке октаэдрически координированный ванадий. Причина возникновения нескомпенсированного магнитного момента в элементарной ячейке в этом случае может быть связана с наличием локальных искажений за счет разницы в ионных радиусах Al^{3+} (0.57 \AA) и V^{3+} (0.67 \AA), приводящих к понижению локальной T_d -симметрии ионов железа, в результате чего они могут стать магнитными в основном состоянии. В парамагнитных образцах 3 и 4 в соответствии с данными химического анализа содержится (3-5) % избыточного алюминия. Однако в отличие от образца 2 атомы Al здесь замещают не ванадий, а железо в немагнитной тетраэдрической координации. Результат такого замещения – парамагнетизм, связанный с наличием магнитных дефектов с величиной момента $\sim 4\mu_B$ [3], под которыми понимается случайная перестановка местами атомов $\text{Fe} \leftrightarrow \text{V}$ и $\text{Fe} \leftrightarrow \text{Al}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-02-01238.

- [1] T. Kanamata *et al*, J. Alloys and Compounds **317-318**, 390 (2001).
 [2] F. Ishikawa *et al*, J. Magn. Magn. Mater. **310**, e616 (2007).
 [3] Daniel I. Bilic, Philippe Ghosez, Phys. Rev. **B 83**, 205204 (2011).

Электронные и магнитные свойства спин-переменных комплексов Fe(III) с тетрадентантным основанием Шиффа

Т.А. Иванова¹, И.В. Овчинников¹, Л.В. Мингалиева¹, И.Ф. Гильмутдинов²,
О.А. Туранова¹, Г.И. Иванова¹, В.А. Шустов¹

¹Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН, Казань 420029, Россия

²Казанский федеральный университет, Казань 420008, Россия

e-mail: alex@kfti.knc.ru

Комплексы Fe(III) с тетрадентантным основанием Шиффа интересны тем, что при вариации их химического состава могут быть получены соединения с разнообразными магнитными свойствами - от моноядерных спин-кроссовер комплексов Fe(III) до более сложных систем, включающих антиферромагнитные цепочки и ферромагнитные кластеры [1-2]. Для получения новых спин-кроссовер материалов с перспективными для практических применений характеристиками (резкий спиновый переход с гистерезисом магнитных свойств) важно обеспечить не только необходимые для спинового перехода условия в комплексах Fe(III), но и высокую кооперативность межмолекулярных взаимодействий за счет водородных и/или π - π связей [3]. Изучение влияния особенностей химического и структурного строения на электронные и магнитные свойства комплексов Fe(III) и характер магнитных взаимодействий между ними является необходимым этапом при решении этой задачи. В данной работе синтезированы и изучены методами ЭПР и магнитной восприимчивости в диапазоне температур (5-300)K соединения типа $[\text{FeLX}_2]\text{Y}$, с L=salen, asen, vanen, X=Him, CH_3Him , Pic, Pyr, Y= BF_4 , ClO_4 , BPh_4 (многие из них - впервые).

Изучено влияние некоторых особенностей химического и структурного строения комплексов $[\text{FeLX}_2]\text{Y}$ на спиновое состояние иона Fe(III). Показано, что для асен-содержащих комплексов с X= CH_3Him и Y= BF_4 , ClO_4 , характерно низкоспиновое состояние ионов Fe(III), для salen-содержащих, отличающихся только типом тетрадентантного плоскокостного лиганда L – высокоспиновое. Изменение спинового состояния объяснено различием донорных свойств плоскокостного лиганда.

Возможность изменения спинового состояния при введении заместителей в лиганды L и X продемонстрирована на примере соединений $[\text{Fe}(\text{asen})\text{X}_2]\text{BPh}_4$ (при X=Him комплексы Fe(III) низкоспиновые во всем интервале температур, при X= CH_3Him наблюдается спиновый переход в интервале температур (190-340) K) и $[\text{FeL}(\text{CH}_3\text{Him})_2]\text{ClO}_4$ (при L=salen комплексы Fe(III) высокоспиновые во всем интервале температур при L=3MeO-salen – низкоспиновые).

В соединении $[\text{Fe}(\text{salen})(\text{CH}_3\text{Him})_2]\text{Y}$ с Y= BPh_4 обнаружены особенности, свидетельствующие о более сильном межмолекулярном взаимодействии между комплексами Fe(III) по сравнению с алогичными соединениями с анионами Y= BF_4 , ClO_4 . Существенные отличия магнитных свойств BPh_4 - содержащих соединений связаны, вероятно, с возникновением межмолекулярных π - π -связей, включающих бензольные кольца противоионов BPh_4 .

Проанализировано влияние условий синтеза на магнитные свойства тетрадентантных комплексов Fe(III) с лигандом (salen) и бидентантным лигандом (Pyr). Установлено, что изменение соотношения (salen):(Pyr) при синтезе образцов приводит к образованию различных кристаллических структур. Различие кристаллических структур образцов с соотношением (salen):(Pyr) 1:1 и 1:2 подтверждено X-ray измерениями. Данные, полученные методами ЭПР и магнитной восприимчивости для образца с соотношением (salen):(Pyr) 1:1, интерпретированы в предположении, что ионы Fe(III),

связанные молекулами (Pyr), образуют линейные цепочки с антиферромагнитным взаимодействием $J \sim -40$ см⁻¹. В образце с соотношением (salen):(Pyr) 1:2 ионы Fe(III), связанные молекулой Pyr, образуют биядерные комплексы. Наблюдается сигнал от мультиплета $S=3$ с параметрами тонкой структуры $D=650$ э и $E=5$ э. По данным магнитной восприимчивости этот образец обладает слабым ферромагнетизмом в низкотемпературном диапазоне, что согласуется с увеличением интегральной интенсивности спектров ЭПР ниже 10К.

На примере соединения $[\text{Fe}(\text{acen})\text{pic}_2]\text{BPh}_4$ показана возможность возникновения кооперативных взаимодействий за счет непрямого обмена между ионами Fe(III) через водородные связи. В образце $[\text{Fe}(\text{acen})\text{pic}_2]\text{BPh}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ по данным магнитного резонанса установлено существование ферромагнитных взаимодействий между комплексами Fe(III) в отличие от их свойств в негидратированном $[\text{Fe}(\text{acen})\text{pic}_2]\text{BPh}_4$ [4]. Ферромагнитное упорядочение в образце при $T < 100\text{K}$ подтверждено измерениями температурной и полевой зависимости намагниченности образца. Температурная зависимость интегральной интенсивности сигнала магнитного резонанса объяснена переходом части высокоспиновых ионов в низкоспиновое состояние при понижении температуры ниже 100К.

- [1] J. van Koningsbruggen P., Maeda Y., Oshio H.: Iron(III) Spin Crossover Compounds. In Topics in Current Chem., vol.233, p.239-324. Heidelberg: Springer 2004.
- [2] Herchel R., Sindelar Z., Travnicek Z., Zboril R., Vanco J.: Dalton Trans., 9870-9880 (2009).
- [3] Cantin C., Kliava J., Marbeuf A., Mikailitchenko D.: Eur. Phys. J. **B12**, 525-540 (1999).
- [4] Ohshio H., Maeda Y., Takashima Y.: Inorg.Chem. **22**, 2683-2689 (1983).

Восстановление сигнала спиновых нутаций парамагнитных центров в ионных кристаллах

И.К. Ишмуратов

Казанский Федеральный Университет, 420008, Кремлевская, 18, г. Казань, Российская Федерация

e-mail: reishmur.ba4@yandex.ru

Как известно, одним из способов реализации квантовых вычислений является использование состояний ядерного или электронного спина. Адресация состояний может осуществляться стандартными техниками ЯМР и ЭПР. Преимуществом использования электронных состояний является значительно бóльшая величина расщепления в магнитном поле, что позволяет осуществлять вычисления при температуре порядка нескольких кельвин. В случае использования парамагнитных центров в ионных кристаллах важной характеристикой является время затухания спиновых нутаций (осцилляций Раби). Обязательное наличие ненулевой ширины линии резонанса и неоднородности амплитуды СВЧ поля в пределах кристаллического образца приводит к паразитному затуханию осцилляций суммарного магнитного момента. Для компенсации нежелательных вкладов в ЯМР высокого разрешения успешно применяются корректирующие последовательности, а именно: BB1 для устранения ошибок длительности импульса [1,2] и CORPSE в случае расстройки частоты импульса [3].

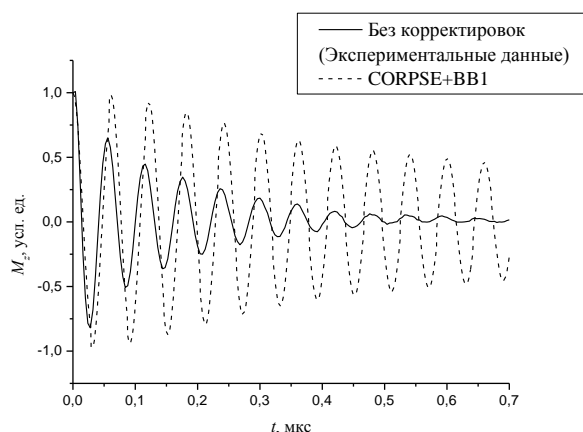


Рис. 1. Осцилляции Раби в кристалле $\text{CaWO}_4:\text{Er}^{3+}$. Экспериментальные данные [4] и результаты моделирования представлены сплошной и пунктирной линиями, соответственно

паразитных эффектов, обеспечивая таким образом более длительную когерентность в ансамбле спинов. Таким образом, применение данных корректировок в случае магнитоизлучающего кристалла оказывается вполне успешным.

Автор благодарит фонд некоммерческих программ «Династия» и проект РФФИ 14-02-00826 за финансовую поддержку.

- [1] S. Wimperis, J. Magn. Res. **109**, 221-231 (1994).
- [2] J.J.L. Morton et al, Phys. Rev. Lett. **95**, 200501(1-4) (2005).
- [3] W.G. Always, J. Jones, J. Magn. Res. **189**, 114-120 (2007).
- [4] S. Bertaina et al, Nature Nanotech. **2**, 39-42 (2007).

Целью данного теоретического исследования являлась проверка эффективности выбранных последовательностей для восстановления сигнала спиновых нутаций в реальных кристаллах. С помощью пакета MATLAB было выполнено моделирование затухания осцилляций Раби в кристаллах $\text{CaWO}_4:\text{Er}^{3+}$ (малая ширина линии ЭПР, см. Рис. 1) и $\text{CaWO}_4:\text{Cr}^{5+}$ (ширина линии порядка частоты Раби). Было показано, что одновременное использование обеих последовательностей, особенно в случае кристалла $\text{CaWO}_4:\text{Er}^{3+}$, существенно уменьшает спад амплитуды осцилляций за счет

Фононы, спин-фононное и электрон-фононное взаимодействие по спектрам ИК-отражения кристаллов $GdFe_3(BO_3)_4$ и $TbFe_3(BO_3)_4$ Кащенко М.А.^{1,2}, Климин С.А.², Кузьменко А.Б.³¹ Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)² ФГБУН Институт спектроскопии Российской Академии Наук, 142190, ул. Физическая, 5, г. Москва, г. Троицк³ DPMC, University of Geneva, 1211 Geneva 4, Switzerlande-mail: klimin@isan.troitsk.ru

Редкоземельные (PЗ) ферробораты $RFe_3(BO_3)_4$ (R – редкая земля) являются общепризнанными мультиферроиками. В них наблюдается взаимодействие различных подсистем, в том числе магнитной, зарядовой и решеточной [1,2], что вызывает большой интерес как с точки зрения фундаментального понимания механизмов взаимодействий, так и возможных перспектив создания новых устройств. Исследование активных в КРС фононов [3] позволило получить важную информацию как о структурном переходе ($T_S=156$ К для $GdFe_3(BO_3)_4$ и 199 К для $TbFe_3(BO_3)_4$), так и о спин-решеточных взаимодействиях при антиферромагнитном упорядочении ($T_N=38$ К для $GdFe_3(BO_3)_4$ и 40 К для $TbFe_3(BO_3)_4$). В данной работе мы получили впервые информацию о температурном поведении инфракрасных фононов в $GdFe_3(BO_3)_4$ и $TbFe_3(BO_3)_4$ и обнаружили появление новой моды, обусловленной взаимодействием решеточной и электронной подсистем в $TbFe_3(BO_3)_4$.

Исследованы спектры отражения в поляризованном свете (параллельно $E||c$ и перпендикулярно $E\perp c$ оптической оси) в широком спектральном ($50-7000$ cm^{-1}) и температурном (7-300 К) диапазонах. Проведен теоретико-групповой анализ (ТГА), получены сведения о количестве фононов, их симметрии и отнесении их к типу колебаний (внутренние и внешние колебания молекулярных BO_3 -групп) для пространственной группы $R32$ (высокотемпературная структурная фаза [4]). Проведено моделирование спектров отражения, получены параметры фононов.

Фононный спектр в диапазоне температур от комнатной вплоть до температуры структурного фазового перехода T_S полностью соответствует результатам ТГА. Структурный фазовый переход в пространственную группу $R3_121$ при понижении температуры ниже T_S сопровождается сдвигом фононов высокотемпературной фазы и появлением новых фононов, обусловленным утроением примитивной ячейки. Фазовый переход с упорядочением в антиферромагнитную фазу приводит к небольшим сдвигам фононных частот, что предположительно обусловлено, согласно литературным данным, магнитострикцией во внутреннем магнитном поле. Взаимодействие штарковского уровня иона Tb^{3+} и фонона (с энергиями вблизи 200 cm^{-1}) приводит к появлению в спектре отражения $TbFe_3(BO_3)_4$ новой связанной моды.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФ (грант №14-12-01033).

[1] А.К. Звездин и др., Письма в ЖЭТФ, **81** (2005) 272.

[2] F. Yen, et al., Phys. Rev. B **73** (2006) 054435.

[3] D. Fausti et. al., Phys. Rev. B **74** (2006) 024403.

[4] S. Klimin, et al., Acta Cryst. B **61** (2005) 481.

Отсутствие дальнего магнитного порядка в кристалле Tb₂Ti₂O₇ при низких температурах как следствие случайных деформаций, индуцированных дефектами

В.В. Клековкина, Б.З. Малкин, Н.М. Абишев, Э.И. Байбеков

Казанский федеральный университет, 420008, Кремлевская 18, Казань, Россия

e-mail: Vera.Klekovkina@gmail.com

Кубические редкоземельные (РЗ) кристаллы со структурой пирохлора содержат четыре магнитно неэквивалентных подрешетки РЗ ионов, которые образуют сетку соединенных вершинами тетраэдров. РЗ пирохлоры относятся к классу геометрически фрустрированных магнетиков и демонстрируют широкое разнообразие магнитных свойств при низких температурах. В частности, Tb₂Ti₂O₇ обладает свойствами спиновой жидкости. Нижние подуровни основного мультиплета ионов Tb³⁺ в кристаллическом поле симметрии D_{3d} – два некрамеровских дублета с энергетической щелью 12 см⁻¹ и значениями g-факторов $g_{\square} > 10$. Измеренная статическая магнитная восприимчивость при температурах выше 10 К описывается законом Кюри-Вейса с температурой Кюри $\theta = -19$ К, и можно было ожидать перехода титаната тербия в антиферромагнитное состояние при температуре ~1.8 К. Однако, согласно результатам исследований магнитного рассеяния нейтронов, спиновой динамики и релаксации имплантированных мюонов, магнитной восприимчивости и теплоемкости магнитный фазовый переход в титанате тербия не наблюдается вплоть до температур ~0.015 К.

Для объяснения природы спин-жидкостного поведения Tb₂Ti₂O₇ при низких температурах в литературе было предложено две модели. В [1] отсутствие дальнего магнитного порядка объясняется квантовыми спиновыми флуктуациями, которые приводят к эффективному ослаблению антиферромагнитного обменного взаимодействия (модель квантового спинового льда). В [2] предполагается возникновение тетрагональной деформации решетки (локальный квазистатический эффект Яна–Теллера), которая расщепляет основной дублет иона Tb³⁺ за счет понижения симметрии кристаллического поля и, таким образом, подавляет дальний магнитный порядок. Выполненные нами расчеты магнитной восприимчивости титаната тербия в приближении самосогласованного поля предсказывают возникновение антиферромагнитной магнитной структуры при температуре 0.8 К. Расчет магнитной восприимчивости в рамках кластерного приближения (рассматривался один тетраэдр ионов Tb³⁺ в самосогласованном поле остальной части решетки), как и было предсказано в [1], дает меньшее значение температуры магнитного фазового перехода 0.7 К, однако это уменьшение оказывается не слишком значительным. Модель квазистатической тетрагональной деформации была использована в литературе для объяснения положения и интенсивности линий неупругого рассеяния нейтронов, наблюдаемых в области низких энергий, и полевых зависимостей намагниченности при низких температурах. Однако вычисленная в рамках данной модели температурная зависимость теплоемкости не согласуется с экспериментальными данными в области температур ниже 0.12 К, поскольку в случае синглетного основного состояния исчезает вклад электронно-ядерных возбуждений, который играет доминирующую роль в измеренной теплоемкости. Кроме того, спонтанные деформации титаната тербия не наблюдаются в спектрах рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей высокого разрешения.

Авторами настоящей работы предложена альтернативная модель случайных деформаций, обусловленных точечными дефектами кристаллической решетки титаната тербия. Действительно, на дефектность образцов Tb₂Ti₂O₇ указывает ряд

экспериментальных данных, а именно нарушение правил отбора в КРС и ИК спектрах, зависимость результатов измерений теплоемкости, намагниченности, магнитной восприимчивости и спектров рассеяния нейтронов от образца. Многоцентровая структура оптических спектров указывает также на нестехиометрический состав образцов. Известно, что деформации решетки влияют на физические свойства РЗ кристаллов за счет изменения спектра РЗ ионов при понижении симметрии кристаллического поля. Для титаната тербия эти изменения оказываются значительными вследствие сильного электрон-деформационного взаимодействия. Поэтому локальные деформации, обусловленные дефектами кристаллической решетки, могут существенно изменить магнитные свойства $Tb_2Ti_2O_7$ при низких температурах даже при относительно небольшой концентрации дефектов.

Нами было выполнено теоретическое исследование влияния случайных деформаций на физические свойства титаната тербия при низких температурах в рамках модели изотропного континуума. Экстенсивные величины рассчитывались путем усреднения с обобщенной функцией распределения локальных деформаций, обусловленных точечными дефектами в упругом континууме [3]. Параметры гамильтониана электрон-деформационного взаимодействия были рассчитаны в рамках модели обменных зарядов и скорректированы путем анализа экспериментальных данных о магнитострикции. Выполненные расчеты показали, что модель случайных деформаций в упругом континууме позволяет описать результаты измерений неупругого рассеяния нейтронов, температурной зависимости теплоемкости, упругих постоянных и статической магнитной восприимчивости в области температур, в которой соответствующие сдвиги и расщепления уровней энергии в кристаллическом поле сравнимы с тепловыми возбуждениями, в предположении концентрации дефектов порядка нескольких процентов. Таким образом, модель случайных деформаций позволяет отказаться от предположения о возникновении тетрагональной деформации неизвестной природы, исключить имеющиеся противоречия между предсказаниями теории и экспериментом, интерпретировать результаты различных измерений, выполненных на разных образцах. Аналогичные расчеты были выполнены также с учетом упругой анизотропии кристалла $Tb_2Ti_2O_7$. Действительно, при понижении температуры упругие постоянные титаната тербия проявляют аномальное смягчение, обусловленное сильным электрон-деформационным взаимодействием. В области температур ~ 1 К кристалл становится сильно упруго-анизотропным, и модель упругого изотропного континуума становится слишком грубой. Компоненты тензора неоднородной деформации упруго-анизотропного континуума, обусловленной изотропным точечным дефектом, рассчитывались через вторые производные функции Грина решетки и представлялись в виде разложений по сферическим гармоникам второго и четвертого порядков. Показано, что учет упругой анизотропии кристалла приводит к уширению одномерной функции распределения деформаций, позволяя таким образом уменьшить концентрацию дефектов, необходимую для разрушения магнитного порядка титаната тербия в рамках модели локальных деформаций.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-02-00826).

- [1] Molavian H.R. et al., Phys. Rev. Lett. 98, 157204 (2007).
- [2] Bonville P. et al., J., Phys. Rev. B 84, 184409 (2011).
- [3] Malkin B.Z. et al., Phys. Rev. B 86, 134110 (2012).

Зарядовое расслоение блуждающих дырок Co^{4+} в кобальтатах натрия Na_xCoO_2 С.А. Кривенко¹, И.Р. Мухамедшин^{1,2}¹Институт физики Казанского федерального университета, 420008 Казань, Россия²Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, 91405 Orsay, Francee-mail: s.a.krivenko@gmail.com

Основой кристаллической структуры металлических кобальтатов Na_xCoO_2 являются слои CoO_2 , где кислородные октаэдры CoO_6 формируют треугольную решётку Co . Слои чередуются с плоскостями натрия. При $x < 1$ дефицит ионов Na^+ приводит к появлению магнитных дырок Co^{4+} [$3d(t_{2g}^5)$ $s=1/2$], блуждающих в треугольной решётке инертных узлов Co^{3+} [$3d(t_{2g}^6)$ $s=0$]. В системе с $x=2/3$ происходит сильное зарядовое расслоение металлического состояния [1]: дырки избегают каждый четвёртый узел $\text{Co}1$ и аккумулируются подрешёткой кагомэ (узлы $\text{Co}2$). Такое перераспределение напоминает зарядовый порядок, его происхождение в металле не ясно. Существует два подхода к объяснению данного эффекта: (1) он вызывается неоднородным кристаллическим полем специфического упорядочения катионов натрия [1]; (2) дырки самоорганизуются, оптимизируя энергию кулоновских корреляций электронов в $3d(\text{Co})$ оболочках [2].

Чтобы прояснить физику «упорядоченной» металлической фазы, в данной работе мы исследовали её устойчивость при другом упорядочении катионов натрия между слоями в соединении с $x=0.77$ методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Детектированы сигналы от шести неэквивалентных позиций ^{59}Co . Для них определены параметры резонанса: квадрупольные частоты ν_Q и магнитные сдвиги K . В предложенной модели квадрупольная частота узла $\nu_Q = \nu_Q^{\text{latt}} + \nu_Q^{\text{el}}$ состоит из вклада ν_Q^{latt} от кристаллического поля его окружения и локального вклада $\nu_Q^{\text{el}} \sim q\delta$ открытой t_{2g} оболочки, который появляется, когда узел Co занимает дырка. Последний пропорционален квадрупольному моменту t_{2g} орбитали q и концентрации дырок δ . Магнитный сдвиг линии ЯМР также определяется квадрупольным моментом узла: $K \sim q\delta$.

Найдено, что у соединений с $x=2/3$ и $x=0.77$ параметры неэквивалентных позиций Co укладываются в зависимость $\nu_Q \sim K \sim \delta$, а решёточные вклады мало меняются от узла к узлу. Установлено, что в металлической фазе $x=0.77$ происходит перераспределение плотности дырок; они не проникают примерно на четверть узлов, как в структуре кагомэ. Такая универсальность расслоения указывает на его корреляционное происхождение. Упорядочение натрия играет вспомогательную роль, пиннигуя зарядовый порядок. Экспериментальная оценка квадрупольного момента $q \approx 1$ оказалась значительно меньшей его величины $q \approx 6$ в состоянии с орбитальным порядком. Изотропная волновая функция дырки на узле может быть объяснена динамикой t_{2g} орбитальных состояний.

Работа выполнена в рамках программы повышения конкурентоспособности КФУ и при частичной финансовой поддержке РФФИ №14-02-01213а.

[1] H. Alloul *et al.*, Europhys. Lett. **85**, 47006 (2009).[2] L. Boehnke *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 115128 (2012).

Акустические свойства гематита вблизи магнитных ориентационных фазовых переходов

С.А. Мигачев¹, Х.Г. Богданова¹, М.И. Куркин²

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского Казанского научного центра Российской Академии Наук, Казань, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

e-mail: smigach@kfti.knc.ru

Представлены результаты экспериментального исследования квазифононной (квазизвуковой) ветви магнитоупругих волн в гематите (α -Fe₂O₃). Соединение α -Fe₂O₃ (гематит) является легкоплоскостным антиферромагнетиком в температурном интервале от точки Морина $T_M = 262$ К до температуры Нееля $T_N = 950$ К. Интерес к магнитоакустике легкоплоскостных антиферромагнетиков обусловлен несколькими причинами. Одна из них связана с обменным усилением многих эффектов, и магнитоупругих в их числе. Дополнительное усиление магнитоакустические эффекты испытывают вблизи ориентационных фазовых переходов. Фазовые переходы такого типа в легкоплоскостных антиферромагнетиках удается наблюдать в сравнительно слабых магнитных полях до 10 кЭ. Еще одна особенность этих объектов связана с существованием в них ориентационных фазовых переходов под действием одноосного давления. Наконец, такие антиферромагнетики являются наиболее удобными объектами для изучения так называемой магнитоупругой щели в спектре квазимагнойной ветви связанных магнитоупругих волн. Этим и объясняется то обстоятельство, что изучению этой ветви посвящено большинство работ по магнитоакустике легкоплоскостных антиферромагнетиков.

Эксперименты проводились на образце гематита (S), которому была придана форма параллелепипеда размерами по осям $x = 3.61$, $y = 1.9$, $z = 6.53$ mm, соответственно, как показано на рис. 1. Образец имел плоскопараллельные грани, обработанные абразивными порошками с размером зерна до 5 μ m с последующей полировкой. Выбранная ось симметрии второго порядка C₂ была вдоль оси y , сжатие образца (одноосное давление) производилось в базисной плоскости вдоль оси x , внешнее магнитное поле \mathbf{H} прикладывалось также вдоль этого направления.

Для акустических измерений использовалась схема на прохождение. Сдвиговые акустические колебания на частотах ~ 5 MHz, либо в ряде экспериментов $\sim 19 - 50$ MHz, возбуждались пластинчатыми пьезопреобразователями LiNbO₃ x -среза (T1 и T2), присоединенными на твердой склейке, направление распространения звука (\mathbf{k}) – вдоль оси симметрии третьего порядка C₃ (ось z , размер 6.53 mm), плоскость поляризации акустических колебаний была перпендикулярна базисной плоскости гематита и содержала в себе выбранную ось C₂. Таким образом, возбуждалась магнитоинвариантная ξ -мода колебаний, скорость которой V_ξ . Применялась регистрация изменения скорости по сдвигу фазы. В экспериментах по изучению индуцированных магнитным полем либо одноосным сжатием изменений измерялось изменение пропускания квазизвука через образец с приклеенными пьезопреобразователями. Абсолютное значение скорости распространения квазизвука определялось по частотам размерных акустических резонансов образца при приложении магнитного поля (> 2 кЭ), либо достаточного сжатия (> 60 МПа), т.е. в условиях, когда происходило сильное уменьшение затухания квазизвука в образце.

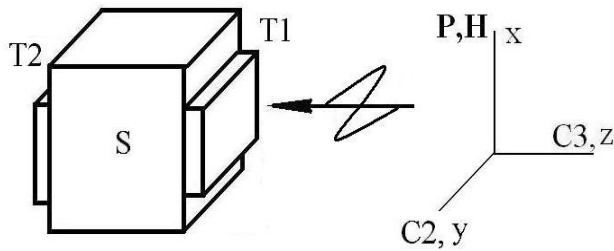


Рис.1 Схема эксперимента

На рис.2 приведена зависимость $V_{\xi}(H)$ при $P = \text{const}$. Экспериментально также были получены зависимости $V_{\xi}(P)$ при $H = \text{const}$. Наиболее интересными особенностями зависимостей $V_{\xi}(H)$ при $P = \text{const}$ и $V_{\xi}(P)$ при $H = \text{const}$ мы считаем следующие:

1. Наличие минимумов на кривых $V_{\xi}(H)$ при всех выбранных значениях P .
2. Значения полей $H = H_{\min}$ в точках минимума $V_{\xi}(H)$ при $P = \text{const}$ растут с ростом P .
3. С ростом P растет также ширина этих минимумов.
4. Минимумы присутствуют также на кривых $V_{\xi}(P)$ при $H = \text{const}$, но для значений $H \leq 3$ кЭ.
5. При $H > 3$ кЭ минимумы на кривых $V_{\xi}(P)$ превращаются в протяженные плато.

Проведено сравнение этих результатов с выводами существующей теории магнитоакустических явлений [1].

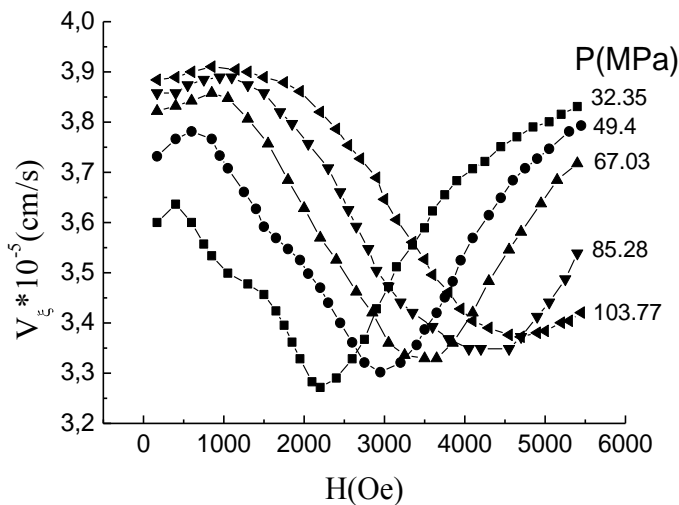


Рис.2 Зависимость скорости квазизвука (V_{ξ}) от магнитного поля для различных величин приложенных давлений P .

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект 14-02-00260)

[1] Е.А. Туров, В.Г. Шавров. УФН **140**, 429 (1983).

**^{55}Mn ЯМР исследование состояния марганца в магнетиках
 $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$ и $\text{Mn}_{0,25}\text{NbS}_2$**

В.В. Оглобличев¹, С.В. Верховский¹, Ф.Б. Мушенок²

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия

e-mail: ogloblichev@imp.uran.ru

Настоящая работа посвящена исследованию валентного состояния ионов марганца в соединении $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$, в котором Y. Kousaka et al. [1] предположили возможность геликоидального магнитного упорядочения ниже температуры $T = 40\text{K}$.

Согласно литературным данным [2], эффективный магнитный момент ионов марганца для $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$ составляет $(5 - 5,6) \mu_B$, а для $\text{Mn}_{0,25}\text{NbS}_2$ – $5,4 \mu_B$. Получается, что эффективный магнитный момент марганца ближе к значению для $S = 5/2$ и валентному состоянию Mn^{2+} ($\mu_{\text{eff}} = g(S(S+1))^{0,5} \approx 5,9 \mu_B$). По другим экспериментальным данным [3] эффективный магнитный момент составляет $(4,82 - 5,16) \mu_B$, что ближе к $S = 2$ и Mn^{3+} ($\mu_{\text{eff}} \approx 4,9 \mu_B$). Поэтому вопрос валентного состояния марганца в интеркалированных соединениях Mn_xNbS_2 является актуальным и открытым.

В настоящей работе впервые выполнены эксперименты по измерению спектров ЯМР ядер марганца ^{55}Mn в монокристалле $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$ в нулевом внешнем магнитном поле $H_0 = 0$ и температуре $T = 4,2\text{K}$. В диапазоне частот (300 - 520) МГц наблюдается две линии с центрами на $\nu_1 \approx 442\text{MГц}$ и $\nu_2 \approx 468\text{MГц}$ (Рис. 1), что соответствует локальному полю на ядре марганца 422 кЭ и 446 кЭ.

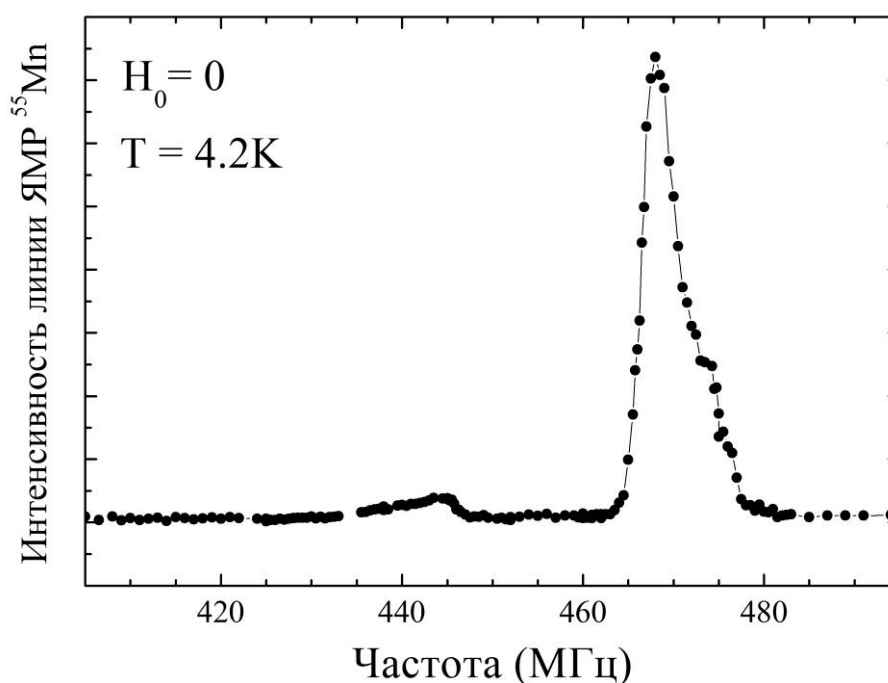


Рис. 1. Спектр ЯМР ^{55}Mn .

Рентгеноструктурный анализ и исследование температурных зависимостей намагниченности в SQUID в двух магнитных полях 20 Э и 10 кЭ, показали, что в исследуемых монокристаллах с фазой $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$ ($T_N = 40$ К) сосуществует дополнительная фаза (около 15%), соответствующая соединению $\text{Mn}_{0,25}\text{NbS}_2$ ($T_N = 100$ К). Поэтому можно сделать вывод, что интенсивная линия на частоте $\nu_2 \approx 468$ МГц соответствует соединению $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$, а ЯМР линия на частоте $\nu_1 \approx 442$ МГц – $\text{Mn}_{0,25}\text{NbS}_2$.

Типичные значения частот для различного валентного состояния ионов марганца в манганитах составляют: Mn^{2+} – 605 МГц, Mn^{3+} – 410 МГц и Mn^{4+} – 330 МГц [4]. Поэтому валентное состояние марганца в $\text{Mn}_{0,33}\text{NbS}_2$ и $\text{Mn}_{0,25}\text{NbS}_2$ ближе к состоянию Mn^{3+} , чем к Mn^{2+} .

Данная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» №01201463330 при поддержке РФФИ (проект № 15-02-02000) и гранта Президента РФ (МК-1474.2014.3).

- [1] Y. Kousaka et al., Nucl. Instr. and Meth. A 600, 250, 2009.
- [2] S. S. P. Parkin and R. H. Friend, Philosophical magazine 41, 65-93. 1980.
- [3] K. Anzenhofer et al., Journal of Physics and Chemistry of Solids 31, 1057–1067, 1970.
- [4] D. Abou-Ras et.al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials 233, 147–154, 2001.

Упругие постоянные $R_2Ti_2O_7$ ($R=Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Y$): *ab initio* расчет

В.П. Петров, В.А. Чернышев, А.Е. Никифоров

Уральский федеральный университет им. Первого Президента РФ Б. Н. Ельцина, 620002, ул. Мира, г. Екатеринбург, Россия

e-mail: vchern@inbox.ru

Упругие свойства титанатов со структурой пироклора в существенной степени определяют их применение. В последнее время упругие постоянные $R_2Ti_2O_7$ были определены экспериментально [1,2], однако, результаты измерений для одних и тех же соединений в различных работах (например, для $Ho_2Ti_2O_7$ в [1] и [2]) различаются в несколько раз. Это делает актуальным *ab initio* расчет упругих постоянных для всего ряда соединений $R_2Ti_2O_7$, обладающих структурой пироклора ($R=Gd-Lu$ и Y). Расчеты были проведены в приближении МО ЛКАО в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридных функционалов B3LYP и PBE0. Расчеты проводились в программе CRYSTAL14 [3], предназначенной для моделирования периодических структур. Для Ti и O были использованы полноэлектронные базисные наборы, для R – псевдопотенциалы с валентными базисными наборами [4].

Для апробации подхода предварительно была рассчитана кристаллическая структура и фононный спектр для всего ряда $R_2Ti_2O_7$ ($R=Gd-Y$), а также зонная структура $R_2Ti_2O_7$. Расчеты показали хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. Для одного представителя ряда – $Gd_2Ti_2O_7$ был проведен расчет влияния гидростатического сжатия на структуру и динамику кристаллической решетки. Изменение объема элементарной ячейки при гидростатическом сжатии, полученное в результате расчетов, хорошо описывается уравнением состояния Берча-Мурнагана 3-го порядка. После апробации подхода был проведен расчет упругих постоянных $R_2Ti_2O_7$ ($R=Gd-Y$), который предсказал достаточно небольшое изменение упругих постоянных C_{11} , C_{12} , C_{44} в ряду $R=Gd-Y$.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.571.2014/К)

- [1] Y. Nakanishi, T. Kumagai, M. Yoshizawa. Phys. Rev. B. **83**, 184434 (2011).
- [2] Luan, Yanbing, "Elastic properties of complex transition metal oxides studied by Resonant Ultrasound Spectroscopy." PhD diss., University of Tennessee, (2011). http://trace.tennessee.edu/utk_graddiss/993.
- [3] R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C.M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N.M. Harrison, I.J. Bush, P. D'Arco, M. Llunell, M. Causà and Y. Noël, CRYSTAL14 User's Manual (University of Torino, Torino, 2014).
- [4] Energy-consistent Pseudopotentials of the Stuttgart, <http://www.tc.uni-koeln.de/PP/clickpse.en.htm>.

Влияние давления на геликоидальный ферромагнетизм MnSi

А.А. Повзнер, А.Г. Волков, И.А. Ясюлевич

Уральский федеральный университет, 620002, ул. Мира 19, Екатеринбург, Россия

e-mail: a.a.povzner@urfu.ru

Моносилицид марганца с кристаллической структурой B20 является ферромагнитным длиннопериодическим геликоидом. Формирование длиннопериодической спиновой структуры описывается как результат конкуренции антисимметричного релятивистского взаимодействия Дзялошинского-Мория и неоднородного обменного взаимодействия [1]. Температура Нееля MnSi составляет 29 К при атмосферном давлении и уменьшается практически до нуля при увеличении давления до 1.4 ГПа. При этом возникает необычное квантовое критическое и не ферми жидкостное поведение, природа которого все еще не установлена [2].

В настоящей работе приводятся результаты расчетов электронной структуры MnSi в методе LDA+U для широкого интервала давлений. Получено, что кривая плотности состояний в энергетической области вблизи уровня Ферми изменяется достаточно слабо.

В рамках развитой модели электронной структуры и спин-флуктуационной теории получено хорошее согласие с экспериментальными данными по температурным зависимостям магнитной восприимчивости при различных давлениях. При этом, так же как и в предшествующих исследованиях [3], в парамагнитной фазе получена картина ферромагнитных спиновых флуктуаций с температурным изменением амплитуды спиновых флуктуаций по закону $T^{4/3}$. Учет наряду с внутриатомным и межузельным взаимодействием зонных электронов, дополнительного кирального взаимодействия Дзялошинского-Мория, позволяет получить выражение для температуры Нееля (T_N), которое отличается от оценки температуры ферромагнитной неустойчивости ($T_C(P)$) на небольшую релятивистскую поправку

$$T_N^{4/3} = T_C^{4/3} (1 + 15 |S| D^2 / (16AU^2)) \quad (1)$$

где D – параметр Дзялошинского-Мория ($D \sim 1$ meV), U – константа внутриузельного кулоновского взаимодействия, A – параметр неоднородности обобщенного обменного межузельного взаимодействия (в модели параболической полосы - $A \sim 1/48\pi^2$), $T_C^{4/3} = T_0^{4/3} |S|^{-1} / \kappa$, T_0 – спин-флуктуационная температура, κ – константа спиновой жесткости,

$$\kappa = \langle m^2 \rangle_0^{-1} \left(n^{(eff)} / \sqrt{\langle m^2 \rangle_0} - 2Ug_0 \mu + U \sqrt{\langle m^2 \rangle_0} g_0 \mu - U \sqrt{\langle m^2 \rangle_0} / \sum_{\alpha=\pm 1} g_0 \mu + \alpha U \sqrt{\langle m^2 \rangle_0} \right)$$

а фактор обменного усиления S определяется выражением

$$S^{-1} = 1 - n^{(eff)} / \sqrt{\langle m^2 \rangle_0} + 2\kappa \langle m^2 \rangle_0 / 3,$$

$g_0(\epsilon)$ – функция плотности одноэлектронных состояний, μ – химический потенциал, определяемый из условия электронейтральности, $\langle m^2 \rangle_0$ – квадрат амплитуды нулевых спиновых флуктуаций, который пропорционален квадрату внешнего давления.

Расчет зависимости температуры Нееля от давления находится в соответствии с экспериментальными данными. Оценки волнового вектора геликоидальной структуры (q_0) для достаточно широкого интервала давлений (1.5 ГПа) получаются в соответствии с моделью Бака-Йенсена [1]

$$q_0 = D(1 - S^{-1}) / (4AU) \quad (2)$$

При этом выражение для амплитуды спиновых флуктуаций содержит фактор кирального взаимодействия Морийя-Дзялошинского, а радиус динамических спиновых корреляций уменьшается с давлением, но остается больше периода геликоидально сверхструктуры.

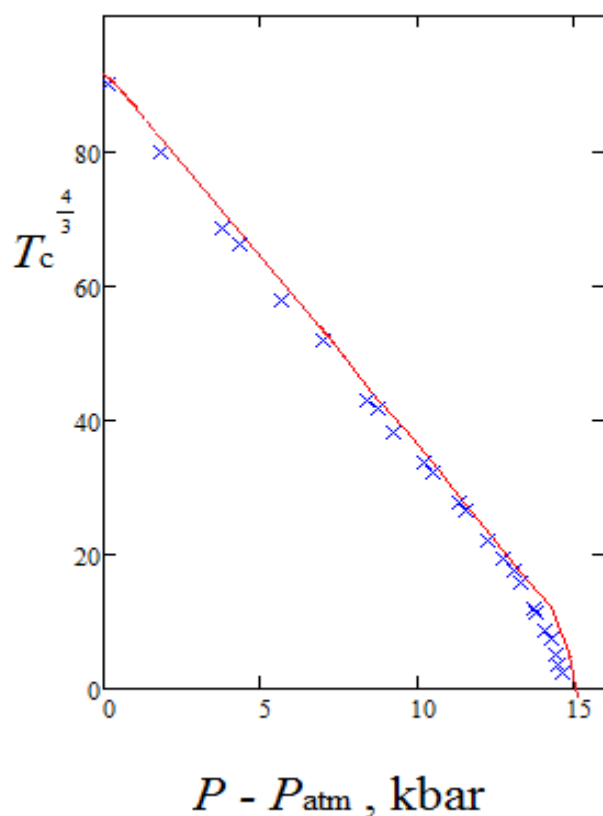


Рис. Зависимость температуры Нееля от давления (сплошная линия-расчет, x - эксперимент [3])

В области высоких давлений, при которых расчетные значения температуры Нееля приближаются к абсолютному нулю, нулевые квантовые спиновые флуктуации становятся значительно больше тепловых, а при давлении 1.52 ГПа имеет место квантовый переход, сопровождающийся исчезновением геликоидального ферромагнетизма (парамагнитная фаза с киральными нулевыми спиновыми флуктуациями).

- [1] P. Bak, M.H. Jensen, Theory of helical magnetic structures and phase transitions in MnSi and FeGe. J. Phys. Vol. 13, P. L881-L885, (1980).
 [2] С.М. Стишов, А.Е. Петрова, Геликоидальный зонный магнетик MnSi. УФН, Vol. 181. P. 1157-1170, (2011).

- [3] C. Pfleiderer, G.J. McMullan, S.R. Julian, and G.G. Lonzarich, Magnetic quantum phase transition in MnSi under hydrostatic pressure. *Phys. Rev. B*, Vol. 55, P. 8330-8338, (1997).

Оригинальный продувной гелиевый криостат для ЯМР исследований в диапазоне температур 1,5 – 450 К

Т.М. Салихов¹, А.В. Клочков¹, К.Р. Сафиуллин¹, Е.Л. Вавилова², М.С. Тагиров¹

¹Казанский федеральный университет, 420008, Кремлевская 18, Казань, Россия

²Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, 420029, Сибирский тракт 10/7, Казань, Россия

e-mail: tmsalikhov@gmail.com

Известно, что для проведения экспериментальных исследований в области ядерного магнитного резонанса, а именно в области изучения литий-ионных проводников, требуется устройство, позволяющее изменять и стабилизировать температуру образца в широком диапазоне температур [1,2]. Такими устройствами являются продувные криостаты (гелиевый или азотный), принцип работы которых известен уже более 20 лет. Данные криостаты изготавливаются многими производителями в области криогеники и являются неотъемлемой частью большинства современных ЯМР-спектрометров высокого разрешения. Но зачастую коммерческие криостаты не могут быть использованы в спектрометрах лабораторного производства в силу тех или иных причин. Поэтому нами был разработан и создан продувной гелиевый криостат для исследования подвижности ионов ⁷Li в образцах Li₃Ni₂SbO₆ и Li₃Cu₂SbO₆ методом ЯМР.

Основными частями криостата являются стеклянный гелиевый заливной криостат лабораторного изготовления и вставка в него, выполненная из нержавеющей и немагнитной стали. В качестве термометров используются следующие датчики: угольный резистор Allen-Bradley 100 Ом (1,5 К – 77 К) и платиновый резистор Pt1000 (77 К – 450 К). Нагреватель выполнен из константановой проволоки. Основными особенностями данного продувного криостата являются общая универсальность и дополнительное экранирование объема с образцом от внешней среды обратным потоком. Для снижения теплового излучения и повышения стабильности используется азотная рубашка.

Эксперименты проводились на импульсном ЯМР-спектрометре лабораторного изготовления, позволяющем проводить измерения в магнитных полях величиной до 1 Тл. Описанный выше криостат позволяет проводить ЯМР эксперименты в диапазоне температур 1,5 – 450 К, со стабильностью температуры лучше 1К. С помощью данного криостата были получены температурные зависимости времен релаксации T₁ и T₂ для ядер ⁷Li. Исходя из температурных зависимостей T₁ и T₂, можно определить такие важные параметры, как энергию активации и время корреляции для ионов лития. Пример температурной зависимости скорости релаксации T₁⁻¹ ядер ⁷Li в порошке Li₃Ni₂SbO₆ представлен на рисунке 1. В районе температуры Нееля T_N=15 К для этого образца наблюдается резкое замедление скорости продольной релаксации ядер лития, связанное с переходом образца в антиферромагнитное состояние. Результаты, а также текущий прогресс по этой работе будут представлены на конференции.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

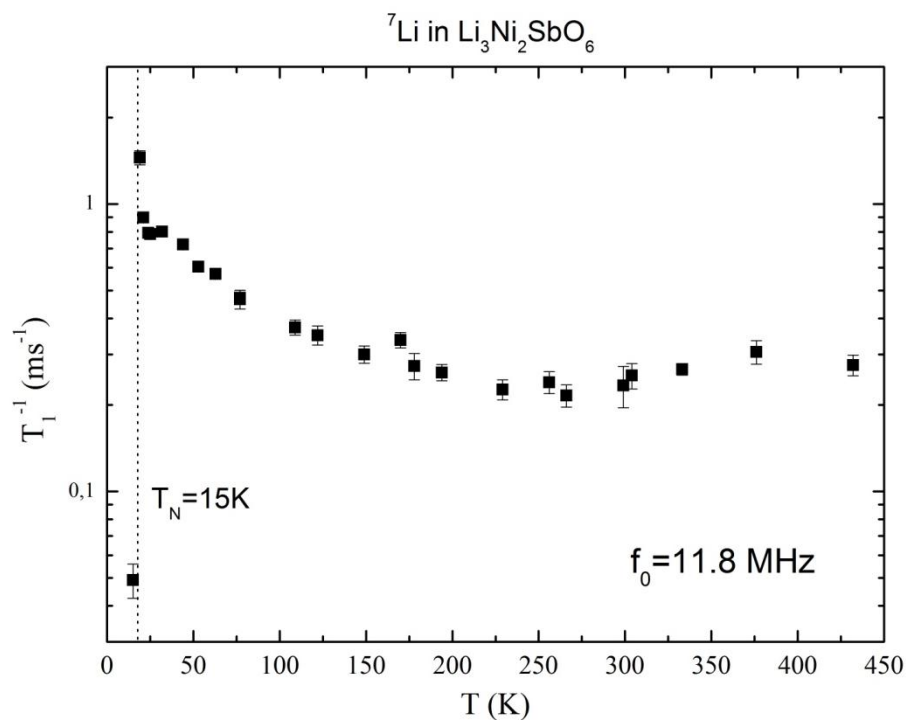


Рисунок 1. Температурная зависимость скорости релаксации T_1^{-1} ядер ${}^7\text{Li}$ в порошке $\text{Li}_3\text{Ni}_2\text{SbO}_6$. Пунктирной линией обозначен фазовый переход в антиферромагнитное состояние.

- [1] Wilkening M. From Ultraslow to Fast Lithium Diffusion in the 2D Ion Conductor $\text{Li}_{0.7}\text{TiS}_2$ Probed Directly by Stimulated-Echo NMR and Nuclear Magnetic Relaxation / M. Wilkening, W. Kuchler, P. Heitjans // *Phys. Rev. Lett.* 97, 065901 (2006).
- [2] Rudisch C. Coupling of Li motion and structural distortions in olivine LiMnPO_4 from ${}^7\text{Li}$ and ${}^{31}\text{P}$ NMR / Christian Rudisch, Hans-Joachim Grafe, Jochen Geck, Sven Partzsch, M. v. Zimmermann, Nadja Wizent, Rudiger Klingeler, Bernd Buchner // *Phys. Rev. B* 88, 054303 (2013).

Магнитный резонанс в квазидвумерном антиферромагнетике Cs_2CuCl_4 в сильном магнитном поле

А.И. Смирнов¹, Т.А. Солдатов^{1,2}, К.Ю. Поваров³, М.Е. Житомирский⁴

¹Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, 119334, Москва, Россия

²Московский Физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

³ETH Zürich, CH-8093, Zürich, Switzerland

⁴CEA INAC, 38054 GRENOBLE cedex 9, France

e-mail: smirnov@kapitza.ras.ru

Соединение Cs_2CuCl_4 представляет собой известный квантовый магнетик, демонстрирующий спин-жидкостное поведение и двухспиновый континуум возбуждений. В экспериментах по электронному спиновому резонансу в этом веществе двухспиновый континуум проявляется в виде так называемого ”спионного” дублета, компоненты которого имеют частоты на границах континуума, см, например, [1]. В данном исследовании мы наблюдаем, как спионный дублет коллапсирует в поле, равном половине поля насыщения. Это находится в качественном соответствии с тем, что континуум должен схлопнуться в сильном поле из-за подавления квантовых спиновых флуктуаций. Кроме того, выше поля насыщения 84.4 Т, мы наблюдаем спектр магнитного резонанса другого типа, содержащий интенсивную линию с ларморовской частотой и добавочную слабую линию, смещенную вниз по частоте на 119 ГГц относительно ларморовской частоты. Наблюдение слабой линии объясняется на основе спин-волновой теории насыщенного антиферромагнетика на искаженной треугольной решетке [2], как проявление обменной моды магнитного резонанса, обусловленной дисперсией магнонов в направлении оси c (см Рис.1). Мы наблюдаем сдвиг резонансного поля этой слабой моды при небольшом нагревании, что свидетельствует о взаимном отталкивании магнонов. Этот тип взаимодействия магнонов ожидается для насыщенного антиферромагнетика, поскольку переброшенные против поля магнитные моменты ионов отталкиваются при антиферромагнитном обмене. Температурная зависимость поля магнитного резонанса хорошо описывается в рамках ангармонической спин-волновой теории без подгоночных параметров, как видно на Рис.2.

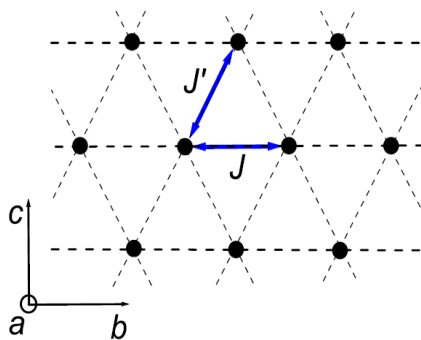


Рис. 1. Обменные связи в Cs_2CuCl_4 .

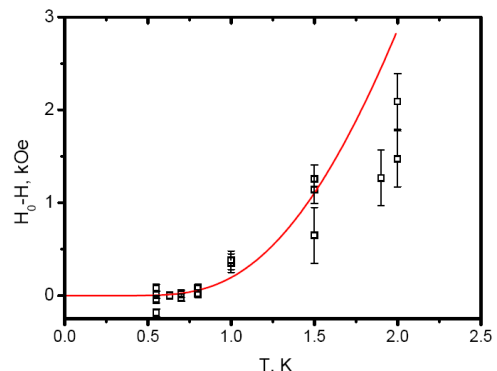


Рис. 2. Сдвиг сигнала ЭСР на частоте 197 GHz при нагревании. Сплошная линия представляет теоретический расчет.

[1] A.I. Smirnov, T.A. Soldatov, K.Yu. Povarov, A.Ya. Shapiro, arXiv:1412.3776.

[2] S.A. Zvyagin et al, Phys. Rev. Lett., 112, 077206 (2014).

Особенности формы спектров ЭПР поликристаллических образцов кластеров с большой одноосной анизотропией магнитных свойств при низких температурах

А.А.Суханов¹, В.К.Воронкова¹, А. Baniodeh², А.К. Powell²

¹КФТИ КазНЦ РАН, ул. Сибирский тракт д. 10/7, г. Казань, Российская Федерация

²Karlsruhe Institute of Technology, University of Karlsruhe, Karlsruhe, Germany

email: ansukhanov@mail.ru

Координационные соединения (как правило, многоядерные кластеры, построенные из 3d, 4f или 3d-4f ионов), которые обладают такими длинными временами релаксации намагниченности, что после выключения магнитного поля намагниченность может сохраняться до нескольких месяцев при низкой температуре, называют мономолекулярными магнитами (Single molecule magnets) [1]. Мономолекулярные магниты считаются перспективными системами для создания новых устройств хранения информации или устройств для квантовой информатики [2]. Мономолекулярные свойства таких соединений обусловлены прежде всего большой магнитной анизотропией кластеров. Ранее нами было показано, что такая анизотропия при низких температурах характерна для кластеров Fe₂Dy₂ [3,4]. Например, для соединения [Fe₂Dy₂(OH)₂(teaH)₂(R-C₆H₄COO)₆] с R=пара-CH₃ наблюдается одноосная анизотропия g-тензора: g_z=19.8, g_x=g_y=0.1.

В данной работе представлены результаты исследования особенностей формы спектров ЭПР поликристаллических образцов ряда близких по составу и строению соединений, построенных из кластеров Fe₂Dy₂. Исследования выполнены в X-, Q- и W-диапазонах при низких температурах (4-15K). Спектры проанализированы с использованием модельных спектров ЭПР.

ЭПР-исследование показало, что форма спектра ЭПР для некоторых соединений данного ряда изменяется после приложения внешнего магнитного поля. Экспериментально изучены факторы, влияющие на изменение формы, и проанализированы возможные причины изменений. Результаты позволяют утверждать, что внешнее магнитное поле порядка 3000 Э частично ориентирует образец вдоль магнитного поля.

Работа поддержана грантом РФФИ № 13-02-01157.

[1] R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi et al., *Nature*, **1993**, 365, 141-143.

[2] M.N. Leuenberger and D. Loss, *Nature*, **2001**, 410, 789-793.

[3] A. Baniodeh, Y. Lan, G. Novitchi et al., *Dalton Trans.*, **2013**, 42, 8926-8938.

[4] A. Sukhanov, R.B. Galeev, V.K. Voronkova, A.Baniodeh, A.K. Powell. EPR study of Dy-containing clusters with SMMs properties. Abstract Book of International conference "Magnetic Resonance: fundamental research and pioneering applications" (23-27 June 2014, Kazan), p. 72.

Низкотемпературная теплоемкость каркасного стекла $\text{Ho}_{0.01}\text{Lu}_{0.99}\text{B}_{12}$

А.Л. Хорошилов¹, А.Н. Азаревич¹, А.В. Богач², М.А. Анисимов², В.В. Глушков^{1,2},
С.В. Демишев^{1,2}, Н.Ю. Шицевалова³, В. Филипов³, С. Габани⁴, К. Флахбарт⁴,
Н.Е. Случанко²

¹Московский Физико-Технический Институт, 141700, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Московская область, РФ

²Институт Общей Физики РАН, 119991, ул. Вавилова, 38, Москва, РФ

³Институт Проблем Материаловедения НАНУ, 03142, ул. Кржижановского 3, Киев, Украина

⁴Институт Экспериментальной Физики САН, 040 01, Ватсонова 47, Кошице, Словакия

e-mail: poligon-51@yandex.ru

Низкотемпературные антиферромагнетики (АФ) $\text{Ho}_x\text{Lu}_{1-x}\text{B}_{12}$ ($T_N \leq 7.4\text{K}$) являются каркасными стеклами с температурой стеклования $T^* = 50-70\text{K}$, в которых сложное АФ-состояние формируется при взаимодействии $4f$ - (локализованные магнитные моменты (ЛММ) ионов Ho) и $5d$ - (зонный магнетизм) компонент магнитной структуры [1-2]. Для выяснения особенностей формирования ЛММ ионов гольмия в этих АФ представляется важным исследовать поведение теплоемкости при низких и сверхнизких температурах в системе без взаимодействия. С этой целью в работе выполнены прецизионные измерения теплоемкости $C(T, H)$ монокристаллических образцов $\text{Ho}_{0.01}\text{Lu}_{0.99}\text{B}_{12}$ в диапазоне температур (0.08÷300K) в магнитном поле до 90 кЭ на установках PPMS-9 и ³He-⁴He minifridge. На рис. 1 показаны температурные зависимости теплоемкости $\text{Ho}_{0.01}\text{Lu}_{0.99}\text{B}_{12}$ и реперного немагнитного соединения LuB_{12} ;

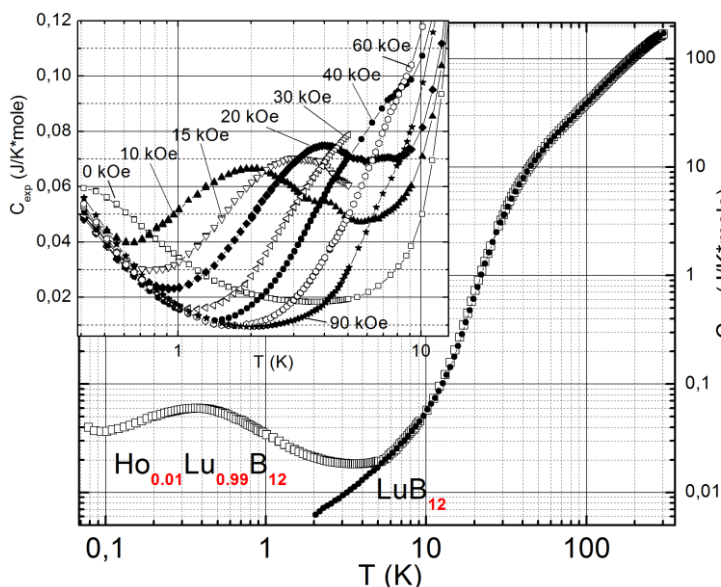


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости $\text{Ho}_{0.01}\text{Lu}_{0.99}\text{B}_{12}$ и LuB_{12} . На вставке показано изменение низкотемпературной теплоемкости $\text{Ho}_{0.01}\text{Lu}_{0.99}\text{B}_{12}$ в магнитном поле.

вычитания из экспериментальных кривых $C(T, H)$ немагнитных вкладов в теплоемкость, представляющий собой низкотемпературные магнитные составляющие $C_m(T, H)$. Аппроксимация полученных кривых $C_m(T, H)$ суммой трехуровневой (триплет Γ_{51} мультиплета 5I_8)

изменение $C(T, H)$ во внешнем магнитном поле представлено на вставке к рис. 1.

В рамках развитого в [1,3] подхода проведена процедура разделения и анализа немагнитных вкладов в теплоемкость $\text{Ho}_{0.01}\text{Lu}_{0.99}\text{B}_{12}$ и LuB_{12} , найдены значения $\gamma = 3.3$ мДж/моль* K^2 , $\Theta_D = 1180$ K, $\theta_E = 168 \pm 8$ K для электронного, дебаевского и эйнштейновского вкладов, соответственно, а также для низкотемпературного вакансионного вклада в $C(T)$ получены концентрация вакансий бора 2,4% и высота барьера в двухъямном потенциале $\Delta E_{\text{TLS}} \approx 81\text{K}$.

На рис. 2а показан результат

результат вычитания из экспериментальных кривых $C(T, H)$ немагнитных вкладов в теплоемкость, представляющий собой низкотемпературные магнитные составляющие $C_m(T, H)$. Аппроксимация полученных кривых $C_m(T, H)$ суммой трехуровневой (триплет Γ_{51} мультиплета 5I_8)

$$C_{\Gamma_{51}} = \frac{N_m R (\Delta E_1 - \Delta E_2)^2 g_1 g_2 e^{-(\Delta E_1 + \Delta E_2)/T} + g_0 g_1 E_1^2 e^{-\Delta E_1/T} + g_0 g_1 E_2^2 e^{-\Delta E_2/T}}{(g_2 e^{-\Delta E_2/T} + g_1 e^{-\Delta E_1/T} + g_0)^2 T^2} \quad (1),$$

и ядерной многоуровневой Шоттки-аномалий

$$C_{nuc} = N_n \cdot \left[\frac{\sum x_m^2 \cdot \exp(-x_m)}{\sum \exp(-x_m)} - \left(\frac{\sum x_m \cdot \exp(-x_m)}{\sum \exp(-x_m)} \right)^2 \right], \quad x_m = \frac{-A \cdot g_{eff} \cdot m}{2 \cdot g_J \cdot T} \quad (2),$$

(g_0, g_1, g_2 – кратности вырождения основного и возбужденных уровней энергии для Γ_{51} и их энергии $\Delta E_1, \Delta E_2$; N_m – концентрация магнитных Шоттки-аномалий, N_n – концентрация ядерных Шоттки аномалий, A – константа сверхтонкого обменного взаимодействия, g_{eff} – эффективный g-фактор, $g_J = 1.25$ – полный g-фактор гольмия, $m = -7/2..7/2$ – проекция момента ядра) позволяет с достаточной точностью описать поведение экспериментальных кривых в представлении об аддитивных зеемановском магнитном и ядерном сверхтонком вкладах и найти концентрацию магнитных центров

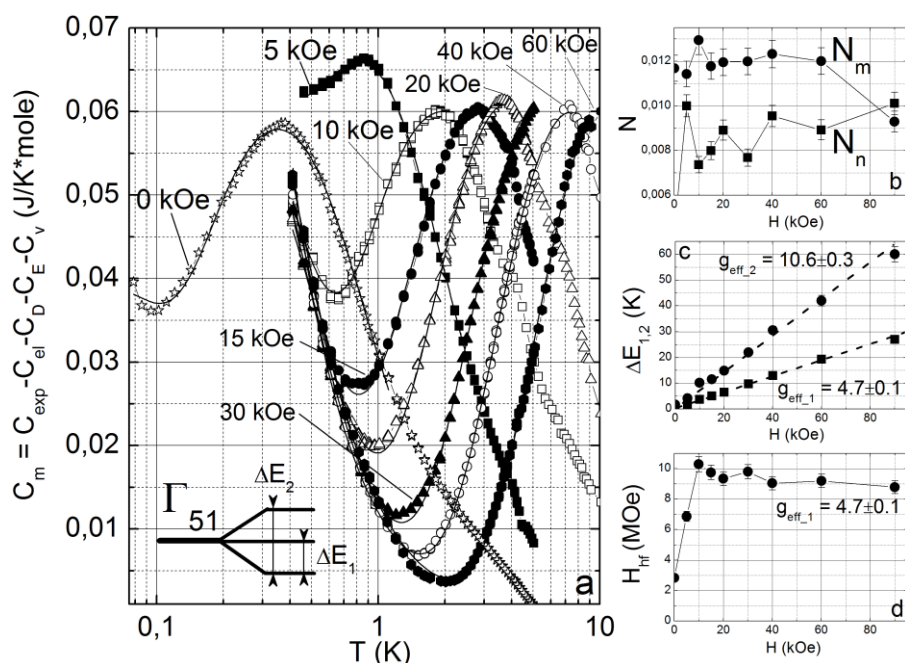


Рис. 2. *a* - Магнитная и ядерная составляющие теплоемкости $Ho_{0.01}Lu_{0.99}V_{12}$ для различных значений поля. Линиями показана аппроксимация кривых соотношениями (1) и (2). Панели *b,c,d* демонстрируют зависимости соответствующих параметров магнитных вкладов от внешнего поля.

$N_{m,n} \sim 0.01$ (рис.2b), g-факторы (рис. 2c) и сверхтонкое поле на ядрах гольмия $H_{hf} \sim 9000$ кЭ (рис. 2d).

Следует подчеркнуть, что найденные в работе для невзаимодействующих ионов гольмия значения $g_{eff,1} = 4.7 \pm 0.1$ и $g_{eff,2} = 10.6 \pm 0.3$ с хорошей точностью соответствуют моментам Γ_{51} состояния и свободного иона Ho^{3+} соответственно, что свидетельствует о неприменимости модели точечных зарядов в случае $Ho_xLu_{1-x}V_{12}$ с

гцк кристаллической структурой. По-видимому, объяснение необычного состояния ЛММ ионов гольмия в матрице додекаборидов RV_{12} следует искать в перенормировке ЛММ вследствие квантового туннелирования иона Ho^{3+} в двухъямном потенциале, аналогично предложенному ранее в [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов Президента РФ МК-6427. 2014.2 и РФФИ № 15-02-02553, а также проекта VEGA 2/0106/13(Словакия).

[1] Н.Е. Случанко, А.Н. Азаревич, А.В. Богач и др., ЖЭТФ **140**, 536 (2011).
 [2] N.E. Sluchanko, A.L. Khoroshilov, M.A. Anisimov et. al., <http://arxiv.org/abs/1503.00854>
 [3] Н.Е. Случанко, А.Н. Азаревич, С.Ю. Гаврилкин и др., ПЖ, **98**, 648 (2013).
 [4] Н.Е. Случанко, А.Н. Азаревич, М.А. Анисимов и др., ПЖ, **100**, 525 (2014).

Изобестическая точка в магнетосопротивлении $\text{Ho}_{0.5}\text{Lu}_{0.5}\text{B}_{12}$

А.Л. Хорошилов¹, А.Н. Азаревич², А.В. Богач², М.А. Анисимов², В.В. Глушков^{1,2},
С.В. Демишев^{1,2}, Н.Ю. Шицевалова³, В. Филипов³, С. Габани⁴, К. Флахбарт⁴,
Н.Е. Случанко²

¹Московский Физико-Технический Институт, 141700, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Московская область, РФ

²Институт Общей Физики РАН, 119991, ул. Вавилова, 38, Москва, РФ

³И-т Проблем Материаловедения НАНУ, 03142, ул. Кржижановского 3, Киев, Украина

⁴Институт Экспериментальной Физики САН, 040 01, Ватсонова 47, Кошице, Словакия

e-mail: poligon-51@yandex.ru

Низкотемпературные антиферромагнетики (АФ) $\text{Ho}_x\text{Lu}_{1-x}\text{B}_{12}$ ($T_N \leq 7.4\text{K}$) являются каркасными стеклами с температурой стеклования $T^* = 50-70\text{K}$, в которых сложное АФ-состояние формируется при взаимодействии $4f$ - (локализованные магнитные моменты (ЛММ) ионов Ho) и $5d$ - (зонный магнетизм) компонент магнитной структуры [1]. Наличие в борной матрице большого числа магнитных ионов гольмия существенным образом влияет на гальваномагнитные свойства данных соединений. Поэтому особый интерес представляет исследование магнетосопротивления $\text{Ho}_{0.5}\text{Lu}_{0.5}\text{B}_{12}$, в котором число магнитных ионов Ho^{3+} оказывается достаточным для формирования бесконечного кластера. С этой целью в данной работе выполнены прецизионные измерения сопротивления $\rho(T, H)$ монокристаллических образцов $\text{Ho}_{0.5}\text{Lu}_{0.5}\text{B}_{12}$ в диапазоне температур (1.5÷300K) в магнитном поле до 80 кЭ. На рис. 1 показаны температурные зависимости магнетосопротивления $\text{Ho}_{0.5}\text{Lu}_{0.5}\text{B}_{12}$ для различных значений внешнего поля.

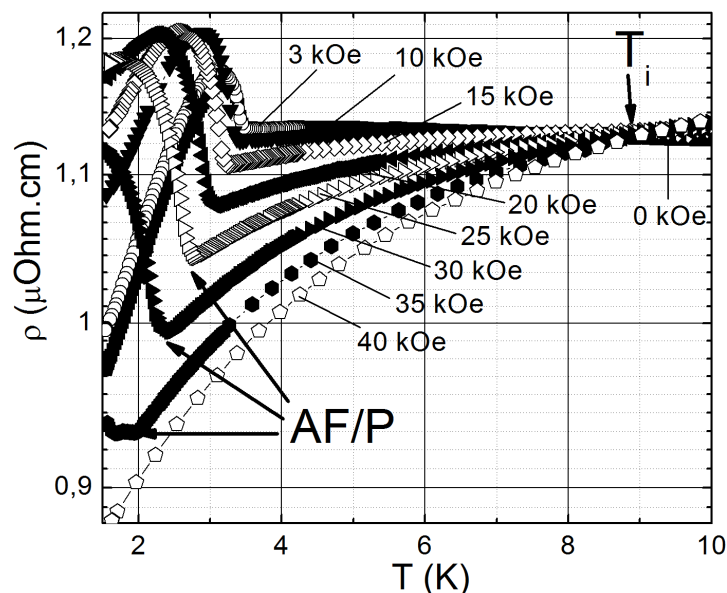


Рис. 1. Температурные зависимости сопротивления от внешнего поля.

На кривых хорошо заметен ряд особенностей, связанных с магнитными фазовыми переходами антиферромагнетик-парамагнетик (АФ/Р). Отдельно стоит отметить, что все кривые пересекаются в окрестности температуры $T_i \approx 8.8\text{K}$ (изобестическая точка, см [2]). Исходя из вида полученных зависимостей, в соответствии с [2], можно предположить, что кривые, оставаясь практически неизменными по форме, масштабируются в диапазоне температур $\Delta T_p \sim 3.5-10\text{K}$.

Для проверки данного предположения был проведен анализ экспериментальных данных в рамках развитого в [2] подхода. Сопротивление было представлено в виде:

анализ экспериментальных данных в рамках развитого в [2] подхода. Сопротивление было представлено в виде:

$$\rho(T, H) = \rho(T, H = 0) + H^2 \cdot \rho'_H(T) + o(H^4), \quad (1)$$

где $\rho'_H = \frac{\rho(T, H_2) - \rho(T, H_1)}{H_2^2 - H_1^2}$ — производная сопротивления по квадрату магнитного поля.

Тогда смасштабированное сопротивление в окрестности данной изобестической точки примет вид:

$$\rho_0 = \rho(T, H = 0) \approx \rho(T, H) - H^2 \cdot \rho'_H(T). \tag{2}$$

На рис. 2а показано семейство кривых ρ_0 для различных значений поля. Легко видеть, что все кривые сопротивления с хорошей точностью совпадают в диапазоне температур 3.5-10К. Таким образом, исходные кривые сопротивления в указанном

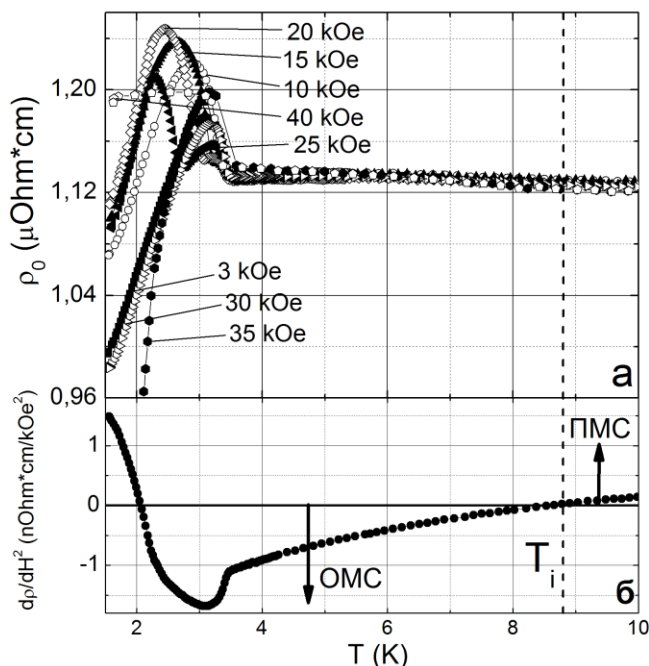


Рис. 2. а – Зависимости сопротивления ρ_0 для различных полей, б – производная сопротивления по квадрату поля.

диапазоне различаются лишь квадратичным по полю слагаемым (см. (2)), что подтверждает предположении о масштабируемости данных кривых.

На рис. 2б изображен график производной сопротивления по квадрату поля. Кривая достигает нулевого значения в точке $T_i \approx 8.8K$, что, согласно теории [2], говорит о наличии в данной области изобестической точки. Отрицательные значения производной (рис. 2б) в области температур 3.5-8.8К свидетельствуют о наличии отрицательного (ОМС) квадратичного по полю вклада в магнетосопротивление, амплитуда которого возрастает с понижением температуры (см. (1)). Аналогично, в области $T > 8.8K$ доминирующим является положительная (ПМС)

квадратичная по полю компонента магнетосопротивления. Эти выводы хорошо подтверждаются данными, полученными в работе [3], в которой отрицательное квадратичное магнетосопротивление аппроксимируется в рамках модели Йосиды ланжевенской зависимостью

$$-\Delta\rho/\rho \sim M^2 \sim \mu_{eff} \cdot L^2(T, H), \tag{3}$$

где μ_{eff} - эффективный момент ионов гольмия, $L(T, H)$ - функция Ланжевена, в то время как положительное магнетосопротивление представлено вкладом, квадратично зависящим от дрейфовой подвижности носителей заряда

$$\Delta\rho/\rho \sim \mu_D^2 \cdot H^2,$$

где μ_D - дрейфовая подвижность носителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов Президента РФ МК-6427. 2014.2, а также проекта VEGA 2/0106/13(Словакия).

[1] Н.Е. Случанко, А.Н. Азаревич, А.В. Богач и др., ЖЭТФ 140, 536 (2011).
 [2] M. Greger, M. Kollar, and D. Vollhardt, Physical Review B 87, 195140 (2013).
 [3] N.E. Sluchanko, A.L. Khoroshilov, M. A. Anisimov et. al., <http://arxiv.org/abs/1412.0497>.

Кристаллическая структура примесных центров Tm^{2+} и Eu^{2+} в $SrCl_2$: *ab initio* расчет

В.А. Чернышев, А.В. Сердцев

Уральский федеральный университет им. Первого Президента РФ Б. Н. Ельцина, 620002, ул. Мира, г. Екатеринбург, Россия

e-mail: vchern@inbox.ru

Кристаллы $SrCl_2$, активированные редкоземельными ионами R^{2+} , привлекают внимание исследователей как перспективные оптические материалы [1]. Электронная структура примесного центра в существенной степени определяется его локальным окружением и динамикой решетки активированного кристалла. В работе в рамках *ab initio* подхода исследована кристаллическая структура примесных центров Tm^{2+} и Eu^{2+} в $SrCl_2$, а также фононный спектр активированной матрицы. Использовалась программа CRYSTAL09, предназначенная для моделирования периодических структур в приближении МО ЛКАО. Расчеты проведены методом Хартри-Фока, а также в рамках теории функционала плотности (DFT) для всех типов функционалов –LDA, GGA и гибридных. Для гибридных функционалов B3LYP и PBE0, наиболее точно (фактически в пределах погрешности эксперимента) описывающих геометрию и зонную структуру $SrCl_2$, были оптимизированы базисные наборы. Все методы качественно предсказывают одну и ту же картину искажений кристаллической решетки вблизи примесного иона R^{2+} . Максимально искажается первая координационная сфера (сжатие на ~ 0.02 Å), смещения во 2-4 сферах не превышают 0.01 Å, и в пятой фактически отсутствуют (Табл. 1).

Таблица 1. Радиальные координаты ионов (Å) вблизи примесного центра (расчеты с функционалом PBE0)

Ион	Чистая решетка	После допирования Tm^{2+}
Cl(8)	3.042	3.022
Sr(12)	4.967	4.961
Cl(24)	5.824	5.816
Sr(6)	7.024	7.015
Cl(24)	7.655	7.655

Информация об искажениях кристаллической решетки позволит в дальнейшем рассчитать электронную структуру примесного центра R^{2+} в рамках модели обменных зарядов [2], интерпретировать имеющиеся экспериментальные данные. Проведенные *ab initio* расчеты также позволят определить неэмпирические параметры межйонных взаимодействий для описания $SrCl_2:R^{2+}$ в оболочечной модели, соответствующей кристаллам с ионным типом связи и не требующей значительных компьютерных ресурсов.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.571.2014/К)

[1] J. Grimm, O. Wenger, K. Kramer, H. Gudel. *J. of Lumin.*, **126**, 2, 590 (2007).

[2] Л.А. Бумагина, Б.Н. Казаков, Б.З. Малкин, А.Л. Столов. ФТТ **19**, 1073 (1977).

Спиновая динамика в кагомэ соединении $\text{YBaCo}_3\text{AlO}_7$

М.Ф. Яковлева^{1,2}, Е.Л. Вавилова^{2,3}, В.Е. Катаев^{2,3}

¹КФУ, 420000, ул. Кремлевская, Казань, Россия

²КФТИ им. Е.К. Завойского, 420029, ул. Сибирский тракт, Казань, Россия

³IFW Dresden, 01069, Helmholtzstraße, Dresden, Германия

e-mail: [ymf.physics@gmail.com](mailto:y mf.physics@gmail.com)

Фрустрации магнитных взаимодействий в коррелированных переходных металлах и оксидах редкоземельных антиферромагнетиков остается «горячей» темой в области магнетизма уже в продолжение последних двадцати лет. Сведенборгит $\text{YBaCo}_3\text{AlO}_7$ - это соединение с магнитной кагомэ решеткой. Основным мотивом такой решетки является треугольник. Таким образом, исследуемый материал является классическим примером геометрически фрустрированной системы. В соединениях с фрустрацией магнитных взаимодействий классический порядок запрещен и, как следствие, возникают различные экзотические основные состояния (например, спин-спиральные структуры, спиновые стекла, спиновые жидкости и т.п.). Нами было исследовано основное состояние $\text{YBaCo}_3\text{AlO}_7$ и спиновая динамика этого материала методом ЯМР-спектроскопии.

Характерные особенности формы спектра и температурных зависимостей скоростей спин-решеточных релаксаций указывают на появление в системе квазистатических короткодействующих корреляций, но отсутствие дальнего антиферромагнитного порядка. Мы сравнили наши результаты с данными измерения динамической и статической восприимчивостей и обсудили возможность реализации спин-стекольного состояния ввиду существенного структурного беспорядка в данном материале.

Low-lying Energy States and Orbital Ordering in FeCr₂O₄

M.V. Eremin, R.A. Fatykhova

Institute of Physics, Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya 18, Kazan, Russian Federation.

e-mail: mikhail.eremin@kpfu.ru

The compound FeCr₂S₄ comes to focus as a potentially new multiferroic material [1]. The Cr³⁺-ions occupy the octahedral sites and their ground configuration is t_{2g}^3 . The Fe²⁺-ions are at the centre of S²⁻ tetrahedron and as a result the ground configuration is $e_g^3 t_{2g}^3$. This state possesses orbital degrees of freedom and yields very rich low energy excitation spectrum, which we are going to discuss in the present communication.

For calculation of energy level scheme we have constructed the effective Hamiltonian:

$$H = -\left(\rho_s + \frac{\lambda^2}{\Delta}\right) \left\{ U_\theta [3S_z^2 - S(S+1)] + U_\varepsilon \frac{\sqrt{3}}{2} (S_+^2 + S_-^2) \right\} + V\rho(U_\theta \cos \varphi + U_\varepsilon \sin \varphi) \quad (1)$$

The first term takes into account the spin-spin and spin-orbit interactions. The second one describes possible distortion of the S²⁻ tetrahedron at low temperatures, when the orbital ordering is established ($T_0 \cong 9K$) [1]. Here $S=2$, U_θ and U_ε are Pauli-like matrices within the orbital doublet ($|g\rangle$ and $|\varepsilon\rangle$ states). In Fig. 1 we show energy levels as a function of φ , which can be considered as an orbital order parameter.

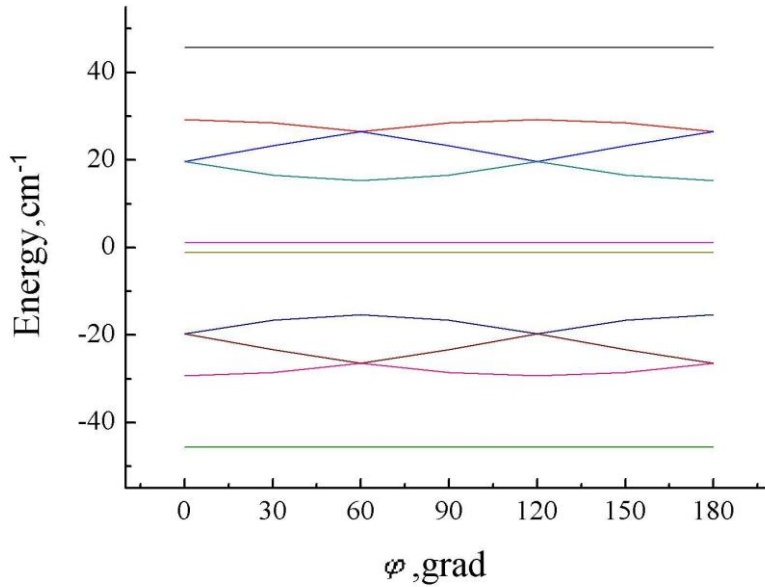


Fig. 1. Low-lying energy levels, parameters are: $V\rho = 7 \text{ cm}^{-1}$, $\rho_s + \frac{\lambda^2}{\Delta} = 3.7 \text{ cm}^{-1}$. The best agreement with the experiment [1,2] corresponds to $\varphi \cong 60^\circ$.

- [1] J. Bertinshaw et al., Scientific Reports. V. 4: 6079 (2014) / DOI: 10.1038/.
 [2] V. Tsurkan et al., Phys. Rev. B. V. 81, 184426 (2010).

Phonon Spectrum of the (Nano)Hydroxyapatite: Calculations and EPR Study

M.R. Gafurov, T.B. Biktagirov, G.V. Mamin, S.B. Orlinskii

Kazan Federal University, Institute of Physics, 420008, Kremlevskaya str 18, Kazan, Russia

e-mail: marat.gafurov@kpfu.ru

One of the major characteristics of the materials in the solid phase is the type and parameters of its phonon spectrum. Experimental techniques applied to the condensed matter often involve knowledge of the lattice for the interpretation of results. The phonon spectrum is necessary to analyze and calculate many physical properties of solids - optical, thermal, electrical, etc. It allows to reduce the number of fitting parameters and improve the reliability of the physical quantities extracted from the experimental data.

A new wave of interest to the apatite based (nano)materials due to their potential and realized applications especially in biomedical area forces to try some untested (or well-forgotten) tools and approaches for their comprehensive characterization and for the control of their physico-chemical properties at different levels.

Temperature dependence of the electronic spin-lattice and spin-spin relaxation times of the radiation-induced nitrogen-centered stable radical NO_3^{2-} in (nano)hydroxyapatite with the crystallite sizes of (20-1000) nm was measured by the inversion-recovery technique in X-band (9 GHz, magnetic field strength of about 0.34 T) and W-band (94 GHz, magnetic field strength of about 3.4 T) in the temperature range (10-300) K. Nitrate anions as precursors of NO_3^{2-} were incorporated from the reagents (by-products) during the wet precipitation synthesis route. The results can be fitted by the Debye model with the Debye temperature of the phonon spectra of 250 K that is half as much as extracted from the elastic and thermal measurements. The experimental findings are compared with the literature data and performed density functional theory (DFT) based calculations. It is proposed that the relaxation times of NO_3^{2-} could be considered as the additional parameters qualifying the micro- and nano- hydroxyapatites' crystallinity and quality.

Spin Dynamics of NV Defects in Diamonds

S.B. Orlinskii, G.V. Mamin, B.V. Yavkin

Kazan Federal University, Institute of Physics, 420008, Kremlevskaya str 18, Kazan, Russia

e-mail: sergei.orlinskii@kpfu.ru

Sintered oriented nanodiamond arrays with the extremely high concentrations of the nitrogen-vacancy (NV) centers (up to 10^3 ppm) were investigated by the W-band (94 GHz) electron spin echo electron paramagnetic resonance techniques. The NV centers were fabricated by the high-pressure high-temperature sintering of detonation nanodiamonds (DND) without the post or prior irradiation of the samples. The processes of polarization and recovery of the equilibrium population of the spin sublevels by optical and microwave pulses have been examined at room temperature in high magnetic fields (Figure 1) corresponding to the fine-structure transitions for the NV defects at 94 GHz (3,250–3,450 mT). A long spin coherence time of $1.6 \mu\text{s}$ and spin–lattice relaxation time of 1.7 ms were measured. The results were compared with those obtained on the NV centers fabricated by the irradiation and subsequent annealing of the commercially available bulk diamonds [1-4].

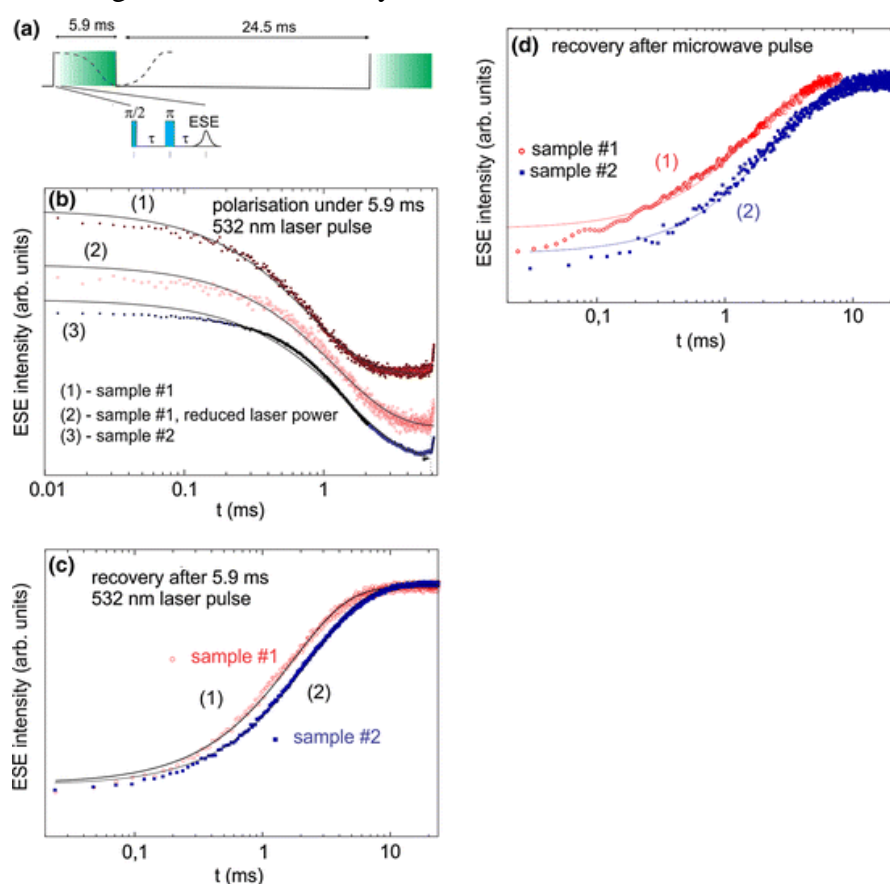


Figure 1. (a) Time diagram of the optical (532 nm) and microwave (3 mm) pulse sequences used to measure the spin dynamics in the ground state of the NV defects. (b) Time dependence of the intensity of the ESE signal under the influence of the 532 nm laser pulse: (1) sample #1, maximal light power; (2) sample #1, the reduced light power; (3) sample #2, maximal light power. (c) The normalized dependences of the ESE signal recovery to the equilibrium value after the 532 nm laser pulse: (1) sample #1; (2) sample #2. All the values were normalized to 1. (d) The normalized dependences of the ESE signal recovery to the equilibrium value after the inverting microwave π pulse (IR microwave sequence): (1) for sample #1, (2) for sample #2. All the curves are measured at $B = 3447.5 \text{ mT}$.

Two types of the diamond samples were investigated. The first type was produced by the sintering of powder the detonation nanodiamonds (DND). The sintered DND powder consists of the dark aggregates and aggregates with the bright red fluorescence under 532 nm green-laser excitation. A fluorescent aggregate with the linear size of about 25 μm was selected and labeled as sample #1.

A micron-sized (of about 100 μm) diamond single crystal (sample #2) was fabricated commercially using by the high-pressure high-temperature (HPHT) synthesis. The initial concentration of the nitrogen impurities in the sample #2 was estimated to be of $\approx 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. The crystal was subjected to the electron irradiation ($\approx 2 \text{ MeV}$) with the dose of $\approx 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ followed by the annealing in the hydrogen atmosphere at $T = 800 \text{ }^\circ\text{C}$ for 2 h. The concentrations of the NV centers that could be produced by this technique without any post or prior irradiation are much higher (about five times) than have been ever reported so far. It is shown that the spin–lattice T_1 and spin–spin relaxation T_2 times for the high-concentrated NV defects in detonation nanodiamonds after HPHT sintering practically do not differ from the corresponding characteristics of the NV defects introduced by the standard method of irradiation and subsequent annealing of the commercial diamond single crystal with a high concentration of nitrogen. The characteristic times of the polarization of the spin sublevels under the action of the pulsed laser excitation and subsequent recovery to the equilibrium populations of the sublevels are close for both types of the materials with the NV defects.

- [1] R.M. Rakhmatullin, I.N. Kurkin, G.V. Mamin, S.B. Orlinskii, M.R. Gafurov, E.I. Baibekov, B.Z. Malkin, S. Gambarelli, S. Bertaina, B. Barbara, Phys. Rev. B 79, 172408 (2009).
- [2] E. Baibekov, I. Kurkin, M. Gafurov, B. Endeward, R. Rakhmatullin, G. Mamin, J. Magn. Reson. 209, 61–68 (2011).
- [3] B.V. Yavkin et al., Appl. Magn. Reson. 44, 1235-1234 (2013).
- [4] B.V. Yavkin et al., Appl. Magn. Reson. 45, 1035-1049 (2014).

Electron-Vibrational Structure of Low-Temperature 5d-4f Luminescence in $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ Crystal

O.V. Solovyev, R.Yu. Yunusov

Kazan Federal University, 420008, Kremlevskaya str., Kazan, Russian Federation

e-mail: oleg.solovyev@mail.ru

In recent years there has been a considerable interest in $4f^n-4f^{n-1}5d$ interconfigurational spectra of rare-earth compounds as a part of effort to design new efficient ultraviolet lasers, phosphors and scintillator materials. In particular, the broad vibronic emission bands of Ce^{3+} -doped crystals make these materials fine candidates for tunable solid-state lasers. In [1] high-resolution 5d-4f emission spectrum of $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ (1%) crystal at 10 K was reported. The ground 4f configuration of the impurity Ce^{3+} ions, substituting for Y^{3+} ions, splits into seven levels (Kramers doublets) in the crystal field of S_4 symmetry. At low temperatures the 5d-4f emission spectrum of $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal consists of seven bands corresponding to transitions from the lowest 5d state to the seven 4f crystal field levels. Several peaks observed in this spectrum were ascribed in [1] to zero-phonon lines of transitions to different 4f crystal field levels, and thereby several 4f crystal field energies of Ce^{3+} in LiYF_4 were announced in [1] for the first time in literature (energy of the ground 4f level is taken as 0 cm^{-1}): 216 cm^{-1} , 2316 cm^{-1} and 2430 cm^{-1} ; energy level at 2222 cm^{-1} also reported in [1] corresponds to the gap between $^2F_{5/2}$ and $^2F_{7/2}$ states of the 4f electron and is well known in literature. However, microscopic modeling of vibronic bands in this emission spectrum was not performed.

In the present study we report on modeling of electron-vibrational structure of 5d-4f emission spectrum in $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal at low temperatures. The microscopic model of electron-phonon interaction derived in [2] was used. Simulation involved calculations of crystal field parameters for a 5d electron as explicit functions of lattice ion's coordinates in the framework of the exchange charge model, numerical diagonalization of the effective impurity ion Hamiltonian containing spin-orbit interaction and the crystal field interactions for the ground (4f) and excited (5d) electronic configurations, calculations of the 5d-electron-phonon coupling constants, and simulations of the band shapes by making use of the realistic phonon spectrum of the host LiYF_4 lattice. Since electron-phonon interaction for the 4f electron is small and can be neglected, electron-vibrational structure of a 5d-4f transition spectrum depends on the 5d state only. The calculated value of the Huang-Rhys parameter for the lowest 5d state of the Ce^{3+} ion in LiYF_4 equals 2.92, corresponding to intermediate electron-vibrational interaction.

Agreement of the calculated 5d-4f emission spectrum in $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ with the measurement results [1] is very good – see Fig.1. Zero-phonon lines of 5d-4f transitions are marked «ZPL i », where i is a number of a 4f crystal field level in the order of energy ascending (note that ZPL 1 is not observed in experiment due to reabsorption [1]). As follows from calculation results, there are three distinguishable vibronic peaks in a spectrum of a 5d-4f transition involving the lowest 5d state, with the energies 65 cm^{-1} (a type), 220 cm^{-1} (b type) and 420 cm^{-1} (c type) with respect to zero-phonon energy. Therefore peaks in the $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal 5d-4f emission spectrum with the energies 216 cm^{-1} and 2430 cm^{-1} (with respect to ZPL 1 energy) should be interpreted as vibronic peaks of b type, originating from transitions to the ground and 4th 4f levels (see Fig.1), but not as zero-phonon lines as they were assigned in [1]. Even if ZPL 2 and ZPL 6 incidentally have close energies, it follows from calculations that the intensities of electric-dipole transitions from the ground 5d state to the 2nd and 6th 4f levels are too small to be distinguished in the spectrum.

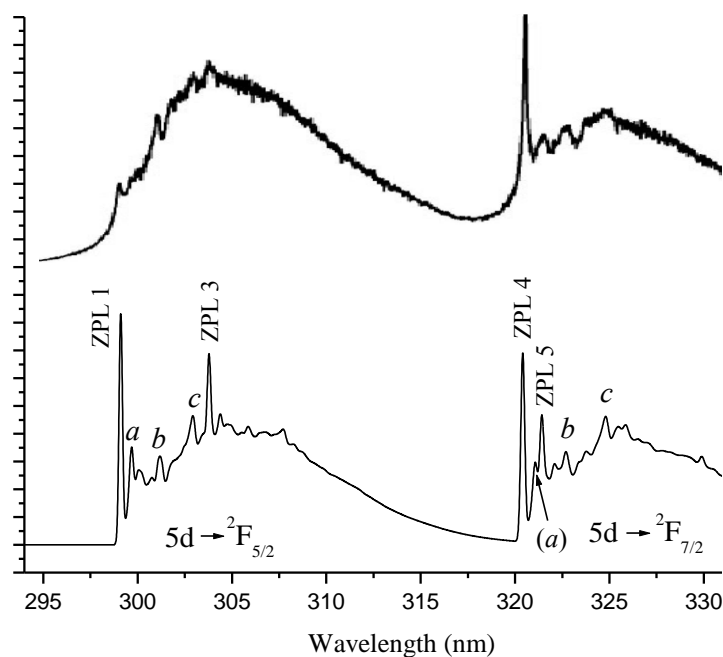


Fig. 1. Calculated for 0 K (lower curve) and measured at 10 K [1] (upper curve) 5d-4f luminescence spectra of the $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal.

It also follows from simulation that the peak in the $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal 5d-4f emission spectrum at 514 cm^{-1} (with respect to ZPL 1 energy), which was not interpreted in [1], should be ascribed to the ZPL 3 (see Fig.1).

In summary, microscopic calculation of electron-vibrational structure of the low-temperature 5d-4f emission spectrum in $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ allowed to give a correct interpretation of experiment results [1] and establish energies of the three excited 4f crystal field levels: 514 cm^{-1} (value reported for the first time), 2222 cm^{-1} (well-known value of the ${}^2\text{F}_{5/2} - {}^2\text{F}_{7/2}$ splitting) and 2316 cm^{-1} (value announced in [1] and confirmed by our simulation – see ZPL 5 in Fig.1). An attempt to estimate crystal field parameters for the 4f electron in $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ was also made taking into account the established 4f crystal field energies and the g-factors of the ground 4f state, reported in literature. Further, the calculated 5d-4f emission spectrum in $\text{LiYF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal was compared with the measured low-temperature 5d-4f emission spectrum in $\text{LiLuF}_4:\text{Ce}^{3+}$ crystal [3] and interpretation of the latter was given.

The authors are grateful to prof. B.Z. Malkin for valuable discussions. The work is performed according to the Russian Government Program of Competitive Growth of Kazan Federal University.

- [1] P.S. Peijzel, P. Vergeer, A. Meijerink, M.F. Reid, L.A. Boatner, G.W. Burdick, *Phys. Rev. B.* **71**, 045116 (2005).
- [2] O.V. Solovyev, B.Z. Malkin. *J. Mol. Struct.* **838**, 176 (2007).
- [3] N.Yu. Kirikova, M. Kirm, J.C. Krupa, V.N. Makhov, E. Negodin, J.Y. Gesland, *J. Lumin.* **110**, 135 (2004).

Функциональные границы в эпитаксиальных гетероструктурах, включающих слои перовскито-подобных сегнетоэлектриков и проводящих манганитов

М.П. Волков, Ю.А.Бойков, В.А. Данилов, И.Т. Серенков, В.И. Сахаров

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Политехническая 26

e-mail: m.volkov@mail.ioffe.ru

Тонкие слои перовскито-подобных манганитов $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ перспективны для использования в чувствительных элементах магнеторезистивных сенсоров и детекторов ИК излучения, а также в варакторных гетероструктурах, управляемых электрическим и/или магнитным полями [1]. Для применения в реальных устройствах эпитаксиальные пленки манганита и сегнетоэлектрика должны быть интегрированы в эпитаксиальной гетероструктуре, сформированной на подложке из соответствующего материала.

Метод лазерного испарения (KrF , $\lambda=248$ nm, $\tau=30$ ns) был использован для того, чтобы сформировать трехслойные эпитаксиальные гетероструктуры, включающие промежуточный слой нелинейного сегнетоэлектрика и манганитные пленочные электроды $-\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3/\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3/\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ (LCMO/BSTO/LCMO). Толщина (d) промежуточного сегнетоэлектрического слоя равнялась 1000 nm, а манганитные электроды имели толщину в 8 раз меньше. Структура манганитных электродов и промежуточного слоя BSTO ($x=0; 0.25, 0.75$) в выращенных трехслойных системах исследовалась с использованием рентгеновской дифракции (Philips X'pert MRD, $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $\omega/2\theta$ – и ϕ – сканы, кривые качания). Фотолитография и ионное травление (Ar, 500V, 0.2 mA) были использованы для формирования контактных площадок ($S = 25 \times 10^{-4}$ см²) в верхнем электроде LCMO и "окон" в промежуточном слое BSTO, чтобы обеспечить контакт с нижним манганитным электродом, общим для всех конденсаторов, сформированных на чипе. Эскиз планарной конденсаторной структуры LCMO/BSTO/LCMO, сформированной на подложке LSATO, показан на Рис.1.

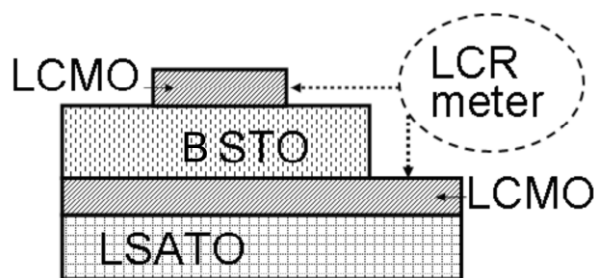


Рис.1. Эскиз планарной конденсаторной структуры с двумя манганитными электродами и промежуточным слоем BSTO. Емкость (C) и диэлектрические потери ($\tan \delta$) для сформированных пленочных плоско-параллельных конденсаторов измерялись с использованием прибора Agilent 4263B LCR meter (частота $f = 100$ Гц-100 кГц).

Из полученных рентгеновских данных следует, что механические напряжения в промежуточном сегнетоэлектрическом слое, индуцированные разницей в параметрах кристаллических решеток манганитных электродов и промежуточного сегнетоэлектрического слоя, в значительной степени релаксировали. Температура Кюри нижнего и верхнего электродов LCMO в сформированных гетероструктурах имела величину порядка 250К.

Температурная зависимость емкости пленочного конденсатора LCMO/STO/LCMO показана на Рис.2. При нулевом напряжении смещения, поданном на манганитные электроды, в соответствие с ожиданиями емкость возрастала с понижением температуры в интервале 10 – 310 К., что обусловлено уменьшением ангармоничности решеточных колебаний. В интервале 30 – 250 К ($E = 0$) обратная величина емкости пленочных конденсаторов практически линейно возрастала с температурой, см. рис.2, кривая 3, и хорошо аппроксимировалась соотношением

$$C^{-1} = S^{-1} \varepsilon_0^{-1} C_0^{-1} d(T - T_{CW}) + C_I^{-1} \quad (1)$$

где $C_0 \approx 0.9 \times 10^5$ К и $T_{CW} = 30$ К равны постоянной Кюри и температуре Кюри-Вейсса монокристаллов титаната стронция, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, соответственно; C_I – емкость межфазных границ в гетероструктуре. Величина C_I зависит от емкости $C_{Int} = 2.3 \times \varepsilon_{LCMO} / L_{eff}$, обусловленной проникновением электрического поля в манганитный электрод, ε_{LCMO} – диэлектрическая проницаемость LCMO, L_{eff} – эффективная глубина проникновения электрического поля в манганитный электрод. Данные по C_I приведены в [2]. Реакция емкости конденсаторов LCMO/STO/LCMO на электрическое поле усиливалась с понижением температуры. При температурах, близких к T_{CW} , уменьшение C пленочных конденсаторов в поле 40 кВ/см достигало примерно 50%, см. рис.2.

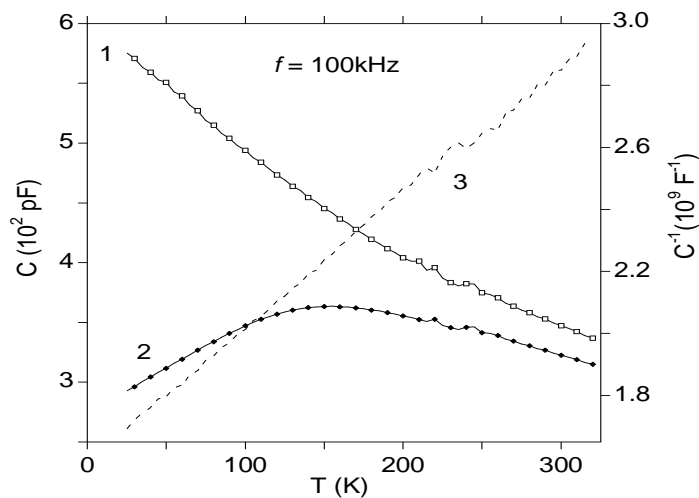


Рис.2 Температурные зависимости емкости C (кривые 1-2) и C^{-1} (кривая 3) пленочного конденсатора LCMO/STO/LCMO, измеренные в электрическом поле $E = V_0/d_1$ различной напряженности. Кривая 1 соответствует $E = 0$, кривая 2 соответствует $E = 50$ кВ/см.

Финансовая поддержка данных исследований была частично получена с проекта РФФИ № 15-02-03996.

[1] Yu.A. Boikov, T. Claeson, Phys.Rev.B 70, 184433, 2004.

[2] Yu.A. Boikov, E. Olsson, T. Claeson, Phys.Rev.B 74, 024114, 2006.

Оптическая спектроскопия и магнитные свойства холдейновского магнетика $\text{Sm}_2\text{BaNiO}_5$

А.С. Галкин^{1,2}, С.А. Климин¹

¹Институт Спектроскопии РАН, 142190 г. Троицк, г. Москва

²ТИСНУМ, 142190 г. Троицк, г. Москва

e-mail: klimin@isan.troitsk.ru

Семейство соединений $R_2\text{BaNiO}_5$ (R -редкая земля) общепризнанно является рядом модельных соединений для изучения одномерного магнетизма. В кристаллической структуре никель образует так называемые холдейновские цепочки ($S_{\text{Ni}^{2+}} = 1$), вследствие чего соединения обладают одномерными магнитными свойствами, самыми характерными из которых являются холдейновская щель и одномерная восприимчивость. $\text{Sm}_2\text{BaNiO}_5$ является наименее изученным представителем семейства. Самарий естественного распространения, обладая существенным количеством легких изотопов, не годится для исследований методом рассеяния нейтронов. Вследствие этого в литературе недостаточно информации о магнитных свойствах самариевого никелата. Оптическое исследование позволило нам получить впервые информацию об ориентации магнитных моментов в АФМ фазе $\text{Sm}_2\text{BaNiO}_5$ и о магнитном g -факторе основного состояния самария.

В данной работе были измерены спектры пропускания поликристаллических образцов $\text{Sm}_2\text{BaNiO}_5$ и $\text{Sm}_2\text{BaNiO}_5:\text{Er}(1\%)$ в широком диапазоне частот ($2000\text{-}20000\text{ см}^{-1}$) и температур ($4.2\div 300\text{ К}$). Были определены положения штарковских уровней иона Sm^{3+} . Магнитное упорядочение ($T_N=57\text{ К}$) было зарегистрировано по расщеплению крамеровских дублетов иона Sm^{3+} и зондового иона Er^{3+} . Метод эрбиевого спектроскопического зонда позволил определить тип магнитной структуры. Данные по температурной зависимости величины расщепления основного состояния самария были использованы для моделирования особенностей магнитной восприимчивости и позволили оценить величину g -фактора основного состояния самария. Малая энергетическая щель между основным и первым возбужденным крамеровскими дублетами самария дала возможность пронаблюдать эффект пересечения энергетических уровней при понижении температуры, когда крамеровские дублеты расщепляются во внутреннем магнитном поле.

Подавление спин-пайерлсовской неустойчивости в кристаллах CuGeO_3 нанометрового размера

М.И. Гильманов^{1,2}, А.В. Семенов¹, А.В. Кузнецов^{1,3}, Н.Н. Мельник⁴, А.В. Григорьева⁵,
Е.А. Гудилин⁵, С.В. Демишев^{1,2}.

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991, ул. Вавилова 38, Москва, Россия

² Московский физико-технический институт, 141700, институтский переулок 9, Долгопрудный, Россия

³ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, Каширское шоссе 31, Москва, Россия

⁴ Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991, Ленинский проспект 53, Москва, Россия

⁵ Московский Государственный Университет, 119991, Ленинские горы 1, Москва, Россия

e-mail: gilmanov@lt.gpi.ru

Квазиодномерный магнетик CuGeO_3 является классической системой с переходом в спин-пайерлсовское состояние при температуре $T_{\text{сп}}=14\text{К}$. Отдельный интерес представляет рассмотрение механизмов подавления спин-пайерлсовского перехода легированием различными примесями. В наиболее распространенном случае легирование приводит к уменьшению температуры перехода $T_{\text{сп}}$ с последующим разрушением димеризованного состояния. При этом антиферромагнитные взаимодействия становятся доминирующими и уже при концентрациях примеси $x>0.01$ появляется дальний антиферромагнитный порядок, что наблюдается в CuGeO_3 , легированном Mg [1], Ni [2] и Zn [3]. Качественно другое поведение возникает в купрате германия с примесями Co[4] и Fe[5]. Результаты экспериментов показывают, что с увеличением беспорядка в образцах $\text{CuGeO}_3:\text{Co}$ и $\text{CuGeO}_3:\text{Fe}$ подавляется спин-пайерлсовская фаза и возникает неупорядоченная фаза Гриффитса [6]. Поскольку фаза Гриффитса образуется из магнитных кластеров нанометрового размера [6], уменьшение характерных размеров кристаллов до нанометровых величин может сильно изменить свойства материала.

В данной работе выполнены исследования статических и динамических свойств нанокристаллов CuGeO_3 . Образцы синтезированы гидротермальным методом [7], причем варьировалось время роста кристаллов. На рисунке 1 приведена микрофотография образцов CuGeO_3 соответствующих времени обработки $t=24$ часа. На основании серии подобных снимков был получен набор статистических данных, позволивший оценить средние продольные и поперечные размеры кристаллитов ($200\times 30\times 30\text{ нм}^3$).

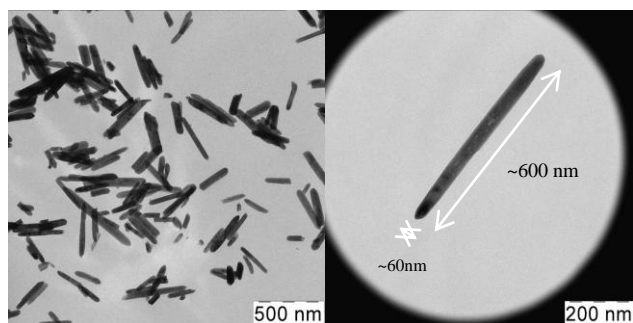


Рис. 1. Изображение нанокристаллов CuGeO_3 (время роста 24 часа), полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии. На правой стороне рисунка приведена фотография образца с размерами близкими к максимальным.

В работе представлен сравнительный анализ измерений электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и магнитной восприимчивости нанокристаллов с макроскопическим кристаллом CuGeO_3 . Обнаружено, что уменьшение размеров кристаллитов до нанометровых величин приводит к полному подавлению спин-пайерлсовского перехода. Магнитная восприимчивость и интегральная интенсивность линий ЭПР демонстрируют температурные зависимости, которые оказываются типичными для систем с квантовым критическим поведением [6]. В частности, высокотемпературная ($T > T_m$)

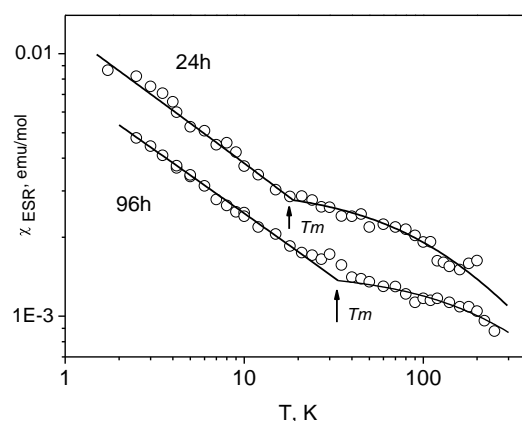


Рис.2 Магнитная восприимчивость $\chi_{\text{ЭПР}}$ двух образцов нанокристаллов CuGeO_3 (время роста 24 и 96 часов) и модельные кривые с параметрами $\alpha=0.5$ и $\alpha=0.48$ для образцов со временем роста 24 и 96 часов соответственно.

Кюри-Вейсовская асимптотика магнитной восприимчивости $\chi \sim \left(\frac{C}{T-\theta} \right)$ переходит в низкотемпературную ($T < T_m$) степенную зависимость вида $\chi \sim \left(\frac{1}{T^\alpha} \right)$ с показателем степени $\alpha < 1$. Экспериментальные данные для двух образцов различного времени роста (24 и 96 часов) и их теоретическая аппроксимация в рамках модели квантового критического поведения показаны на рисунке 2. Результаты, полученные на нанокристаллах CuGeO_3 , оказываются аналогичными картине квантового критического поведения, обнаруженного ранее в монокристаллах макроразмера, содержащих 1% примеси железа [5]. Показано, что наиболее вероятной причиной подавления спин-пайерлсовского перехода в нанокристаллах CuGeO_3 является возникновение замороженного поля, связанного с поверхностью образцов.

Работа поддержана Программами Президиума РАН «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии» и ОФН РАН «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием».

- [1] N. Koide, Y. Uchiyama, T. Hayashi, T. Masuda, Y. Sasago, cond-mat/9805095 (1998).
- [2] B. Grenier, P. Monod, S. Clement, Physica B, 259, 961 (1999).
- [3] M. Hase, I. Terasaki, Y. Sasago, K. Uchinokura, H. Obara. Phys. Rev. Lett., 71, 24, 4059 (1993).
- [4] S.V. Demishev, A.V. Semeno, N.E. Sluchanko et al., Phys. Solid State 46, 2238 (2004).
- [5] S.V. Demishev, Y. Inagaki, H. Ohta, S. Okubo, Y. Oshima, A.A. Pronin, N.A. Samarin, A.V. Semeno, N.E. Sluchanko, Europhys. Lett., 63, 3, 446 (2003).
- [6] S.V. Demishev, Physics of the Solid State, Vol. 51, No. 3, pp. 547–551, (2009).
- [7] L.Z. Pei, L.J. Yang, Y. Yang, C.G. Fan, C.Z. Yang, Qian-Feng Zhang, Materials Chemistry and Physics, 130, 1, 104 (2011).

Высокочастотный электронный спиновый резонанс в твердых растворах $\text{Eu}_{1-x}\text{A}_x\text{B}_6$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Gd}$)

А.Н. Самарин^{1,2}, А.В. Семенов¹, М.И. Гильманов^{1,2}, М.А. Анисимов¹, А.В. Богач¹,
С.В. Демишев^{1,2}, В.Ю. Иванов¹, Н.Е. Случанко¹, А.В. Левченко³, В.Б. Филипов³,
Н.Ю. Шицевалова³, В.В. Глушков^{1,2}

¹Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, 119991, ул. Вавилова, 38, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, 141700, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Россия

³Институт проблем материаловедения им. И.Францевича НАНУ, 03142, ул. Кржижановского, 3, г. Киев, Украина

e-mail: sasha@lt.gpi.ru

Природа эффекта колоссального магнетосопротивления (КМС), наблюдаемого в EuB_6 в окрестности перехода в ферромагнитную фазу ($T_c \approx 13.9\text{K}$), до настоящего времени остается предметом активных дискуссий [1-5]. Большую амплитуду КМС ($\rho(0)/\rho(H) > 1100\%$ [6]) принято связывать с перколяционным переходом полуметалл-металл в системе спиновых поляронов, формирующихся на носителях заряда в условиях сильного ($\sim 0,1$ эВ) обменного взаимодействия между зонными электронами и локализованными магнитными моментами Eu^{2+} [7]. Уникальную возможность для изучения механизмов взаимодействия между локализованными магнитными моментами ионов Eu^{2+} и электронами проводимости в этой системе представляют твердые растворы замещения $\text{Eu}_{1-x}\text{A}_x\text{B}_6$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Gd}$). Замещение европия гадолинием приводит к росту концентрации электронов проводимости и изменению амплитуды и знака косвенного обмена в концентрированной матрице магнитных ионов Eu^{2+} и Gd^{3+} в $^8\text{S}_{7/2}$ -состоянии. Кроме того, усиление беспорядка примесного потенциала в изоэлектронной системе $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{B}_6$ инициирует концентрационный переход металл-диэлектрик с аномальным усилением эффекта КМС до значений $\rho(0)/\rho(7\text{ Тл}) \sim 2,4 \cdot 10^9\%$ [8-9].

В работе представлены результаты исследования высокочастотного (60-100 ГГц) электронного спинового резонанса (ЭСР), намагниченности и гальваномагнитных свойств монокристаллических образцов $\text{Eu}_{1-x}\text{Gd}_x\text{B}_6$ ($x \leq 0.05$) и $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{B}_6$ ($x \leq 0.25$), измеренных в магнитных полях до 8 Тл при температурах 1.8-300К. Оригинальная магниторезонансная методика исследования плоскопараллельных металлических образцов [3] позволила исключить влияние эффектов размагничивания, приводящих к расщеплению линии ЭСР. Измерения транспортных свойств проводились на постоянном токе с использованием стандартной 4-х зондовой схемы. Намагниченность монокристаллов измерялась на установке MPMS-5 (Quantum Design).

Для описания формы линии ЭСР в нелегированном EuB_6 применялась методика абсолютной калибровки резонансной линии в единицах высокочастотной магнитной проницаемости [3]. Анализ экспериментальных данных по мощности микроволнового поглощения $P \sim (\mu/\sigma)^{1/2}$ в $\text{Eu}_{1-x}\text{Ca}_x\text{B}_6$ показал, что в комплексной проводимости $\sigma(\omega) = \sigma_1 + i\sigma_2$ исследуемой системы существенен вклад мнимой компоненты, вследствие чего микроволновая проводимость не совпадает с проводимостью на постоянном токе. В такой ситуации для корректного определения параметров резонанса при моделировании линии ЭСР величина осциллирующей намагниченности

принималась равной статической намагниченности образца, а в качестве параметра σ использовалась комплексная величина.

Анализ магнитных данных показал, что в $\text{Eu}_{1-x}\text{A}_x\text{B}_6$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Gd}$) рост концентрации примеси приводит к уменьшению как величины спонтанной намагниченности M_0 , так и температуры Кюри T_C (рис. 1a). При этом для всех исследованных соединений ширина линии ЭСР $W(T)$ немонотонно зависит от температуры (рис. 1b). В парамагнитной фазе $T > T_C$ ширина линии ЭСР убывает с понижением температуры, что можно объяснить корринговским механизмом спиновой релаксации, наблюдаемым в металлических системах [10]. Напротив, переход в магнитоупорядоченную фазу ($T < T_C$) индуцирует аномальный низкотемпературный рост $W(T)$ (рис. 1b). Необычное поведение $W(T < T_C)$ свидетельствует о том, что дополнительный механизм микроволновых потерь, возникающий в области $T < T_C$ в нелегированном гексабориде европия (рис. 1b), подавляется относительно небольшими концентрациями примеси в $\text{Eu}_{1-x}\text{A}_x\text{B}_6$ ($x \sim 0.01$ в случае Gd и $x \sim 0.1$ в случае Ca). Выяснение природы наблюдаемого эффекта требует проведения дополнительных исследований легированных соединений на основе гексаборида европия.

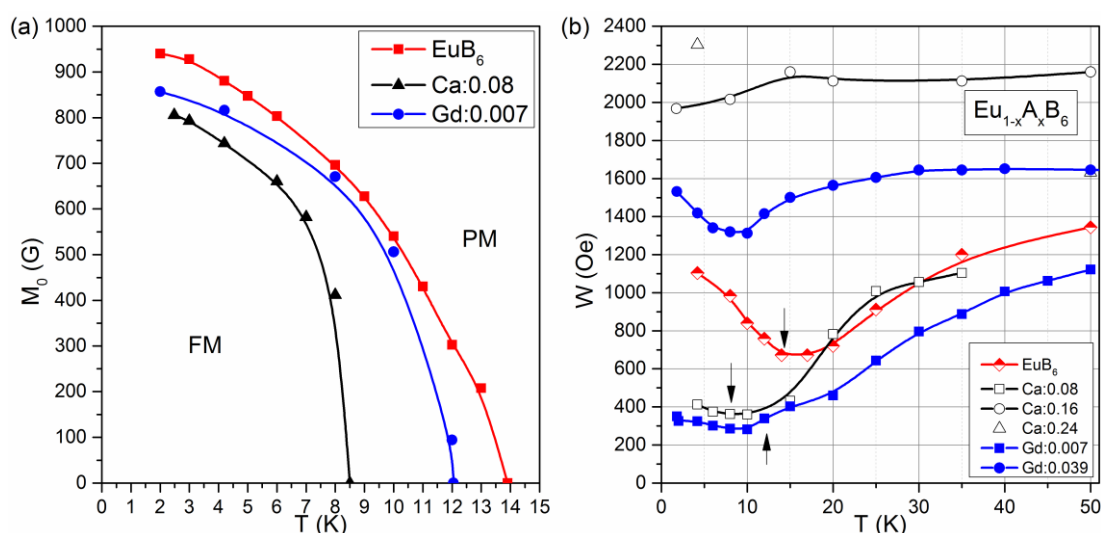


Рис. 1. Температурные зависимости (a) спонтанной намагниченности и (b) ширины линии ЭСР в твердых растворах замещения $\text{Eu}_{1-x}\text{A}_x\text{B}_6$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Gd}$). Стрелками отмечены температуры фазовых переходов.

Работа поддержана грантом РФФИ 13-02-00160 и программами РАН «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии» и «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием».

- [1] X. Zhang, et al., Phys. Rev. Lett., **100**, 167001 (2008).
- [2] J. Kim, et al., Phys. Rev. B, **78**, 165120 (2008).
- [3] A.V. Semeno, et al., Phys. Rev. B, **79**, 014423 (2009).
- [4] V.M. Pereira, et al., Phys. Rev. Lett., **93**, 147202 (2004).
- [5] G. Caimi, et al., Phys. Rev. Lett., **96**, 016403 (2006).
- [6] S. Sullow et al., Phys. Rev. B, **57**, 5860 (1998).
- [7] U. Yu, B.I. Min, Phys. Rev. Lett., **94**, 117202 (2005).
- [8] В.В. Глушков и др., ЖЭТФ, **138**, 277 (2010).
- [9] V. Glushkov et al., Phys. Stat. Sol. B, **250**, 618 (2013).
- [10] S.E. Barnes, Advances in Physics, **30**, 801 (1981).

Низкотемпературные исследования полупроводниковых соединений CuFe_2S_3 и CuFeS_2 методами ядерного резонанса

А.И. Погорельцев¹, В.Л. Матухин¹, Б.В. Корзун², А.Н. Гавриленко¹, С.В. Шмидт¹,
И.Г. Севастьянов¹

¹ФГБОУ ВПО «Казанский государственный энергетический университет», 420066, ул. Красносельская, 51, г. Казань, Республика Татарстан, Россия

²Учреждение образования "Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка", 220030, ул. Советская, 18, г. Минск, Беларусь

e-mail: sevilya1985@mail.ru

В настоящей работе проведен сравнительный анализ результатов исследований методами ядерного резонанса перспективных полупроводниковых соединений тройной системы Cu-Fe-S кубанита CuFe_2S_3 и халькопирита CuFeS_2 , которые принадлежат к ряду медно-железных сульфидов [1].

Выполненные низкотемпературные исследования при 77 К резонансных спектров в данных соединениях [2,3] на ядрах $^{63,65}\text{Cu}$ выявили их сложную структуру, связанную с наличием внутреннего магнитного поля, обусловленного присутствием в их составе магнитного атома железа Fe. В этом случае полный гамильтониан ядерного спина с квадрупольным моментом может быть представлен в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_m + \hat{H}_q \quad (1)$$

где \hat{H}_m – гамильтониан ядерного магнитного взаимодействия, \hat{H}_q – гамильтониан квадрупольного взаимодействия. Если $\hat{H}_m \gg \hat{H}_q$, то в первом приближении теории возмущения спектр ЯМР ^{63}Cu представляет собой триплет с центральной линией, частота которой определяется ларморовской прецессией в магнитном поле, и двумя (для спина $J=3/2$) равноотстоящими сателлитами, что, в общем, и наблюдается в экспериментальных спектрах. Анализ наблюдаемых спектров позволяет предположить, что в данном случае “магнитные” взаимодействия значительно больше “квадрупольных”, т.е. $\hat{H}_m \gg \hat{H}_q$.

В результате проведенного численного моделирования спектров были получены следующие величины: **халькопирит** - ларморовская частота $\nu_L \approx 19.87$ МГц, квадрупольная частота $\nu_Q \approx 1.29$ МГц, параметр асимметрии тензора градиента электрического поля (ГЭП) $\eta \approx 0.34$, угол между направлением магнитного поля и компонентой V_{zz} тензора ГЭП $\beta \approx 94^\circ$, азимутальный угол $\alpha \approx 90^\circ$, значения внутреннего магнитного поля на квадрупольном ядре атома меди $H_0 = \nu_L/\gamma = 17.6$ кЭ; **кубанит** - ларморовская частота $\nu_L \approx 10$ МГц, $\beta \approx 80.1^\circ$, $\alpha \approx 54^\circ$, $H_0 = \nu_L/\gamma = 8.8$ кЭ, значения квадрупольной частоты $\nu_Q \approx 7.3$ МГц и параметра асимметрии тензора градиента электрического поля (ГЭП) $\eta \approx 0.82$.

Полученные квадрупольные параметры были использованы нами для анализа особенностей распределения электронной и спиновой плотностей в области квадрупольного ядра меди. Была использована методика *ab initio* расчетов электронной структуры кластерным методом с “опорой” на экспериментально полученные квадрупольные параметры, что, на наш взгляд, заметно повышает точность этих расчетов.

Для данных соединений были построены карты распределения электронной плотности в области квадрупольного ядра меди и выполнен анализ в рамках теории Р. Бейдера. На основе проведенного анализа можно предположить, что как в кубаните, так и в халькопирите атомы меди связаны с атомами серы благодаря концентрации

электронной плотности внутри бассейна каждого атома, и, следовательно, данная связь не является ковалентной, а образуется по типу взаимодействия закрытых оболочек, которое характерно для ионных, сильно полярно ковалентных и т.п. связей.

Для данных кластеров были построены карты распределения спиновой плотности и выполнены исследования особенностей сверхтонкого взаимодействия на ядрах меди. В частности, в рамках теории функционала электронной плотности были рассчитаны константы изотропного контактного взаимодействия Ферми и константы спин-дипольного взаимодействия.

- [1] L.J. Sabri, *Economic Geology*, V.**68**, No. 4, P.443-454 (1973).
- [2] А.И. Погорельцев, А.Н. Гавриленко, В.Л. Матухин, Б.В. Корзун, Е.В. Шмидт, *Журнал прикладной спектроскопии*, Т.**80**, №3, С.362-367 (2013).
- [3] А.И. Погорельцев, В.Л. Матухин, А.Н. Гавриленко, Б.В. Корзун, *Бутлеровские сообщения*, Т.**35**, №8, 126-132 (2013).

О возможности наблюдения бозе-эйнштейновской конденсации с волновым вектором $k = 0$ в плёнках железо-иттриевого граната

Ю.М. Буньков^{1,2}, П.М. Ветошко³, И.Г. Мотыгуллин², М.С. Тагиров², Н.А. Тукмакова²

¹Институт Нееля, ИЦНИ им. Дж. Фурье, ВР 166, F-38042, Гренобль, Франция

²Казанский федеральный университет, 420008, Кремлёвская, 18, Казань, Россия

³Институт радиотехники и электроники РАН, 125009, Моховая, 11, Москва, Россия

email: Nadejdatukmakova@ya.ru

Бозе-эйнштейновская конденсация (БЭК) представляет собой коллективное квантовое состояние системы, в которой микроскопически большое число частиц описывается одной волновой функцией. БЭК впервые наблюдалась для ультрахолодных (около 170 нК) атомов рубидия [1]. Квазичастицы, такие как магноны, также способны образовывать когерентные квантовые состояния. При этом возможно наблюдение БЭК при более высоких температурах, вплоть до комнатных.

В экспериментах использовались монокристаллические плёнки железо-иттриевого граната (ЖИГ), $T_C = 560$ К. Плёнки толщиной 6 – 9 мкм были выращены на подложке из монокристалла гадолиний-галлиевого граната [2]. Плоскостные размеры образцов составляли около 1 мм. Регистрация спектров ферромагнитного резонанса (ФМР) производилась на ЭПР-спектрометре X-диапазона Varian E-12 ($f \approx 9.3$ ГГц) при комнатной температуре. Внешнее постоянное магнитное поле H_0 было направлено перпендикулярно поверхности образца. Частота модуляции поля H_0 составляла 100 кГц, а амплитуда — 5 мЭ.

На рис.1 показаны интегрированные спектры однородного ($k = 0$) ФМР при различных значениях мощности СВЧ накачки. Поле H_0 разворачивалось в сторону уменьшения. Видно, как сначала происходит рост поглощения энергии СВЧ вследствие образования бозе-конденсата магнонов в объеме образца и возрастания числа N магнонов в конденсате. В момент, когда энергии СВЧ накачки становится недостаточно для поддержания бозе-конденсата, происходит его лавинообразное разрушение, проявляющееся как резкое уменьшение поглощения. Аналогичные результаты получены в работе [3] для магнонов в жидком гелии-3.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

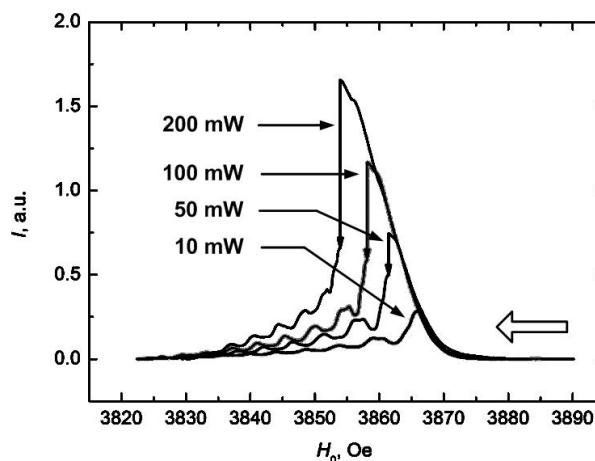


Рис.1. Интегрированные спектры ФМР тонких плёнок ЖИГа при разных значениях мощности СВЧ накачки.

[1] M.H. Anderson et al., Science **269**, 198 (1995).

[2] I.I. Syvorotka et al., IEEE T. Magn., **51**, 2000703, (2015).

[3] S. Autti et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 145303 (2012).

Метильный радикал в матрице твёрдого диоксида углерода

Ю.А. Дмитриев¹, И.А. Зеленецкий², В.Д. Мельников¹

¹ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021, Политехническая ул., 26, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Политехническая ул., 29, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: dmitrievyurij@gmail.com

Твёрдый CO_2 является матрицей, не обладающей ядерными магнитными моментами, и, соответственно, суперсверхтонкое уширение линий спектров ЭПР матрично-изолированных атомов и молекул отсутствует. Это обстоятельство позволяет рассчитывать на получение спектров ЭПР высокого разрешения. На рисунке 1 показан экспериментальный (*a*) спектр ЭПР метильного радикала, CH_3 , в твёрдом CO_2 и его моделирование (*b*), произведённое с помощью программного пакета WINEPR. Спектр является аксиально-симметричным с параметрами $A_{\parallel} = -2.197$ МГц, $A_{\perp} = -2.335$ МГц, $g_{\parallel} = 2.002154$, $g_{\perp} = 2.00266$, $\Delta H_{\parallel} = 0.012$ мТ, $\Delta H_{\perp} = 0.014$ мТ, для *A*-линий, и $A_{\parallel} = -2.196$ МГц, $A_{\perp} = -2.338$ МГц, $g_{\parallel} = 2.002192$, $g_{\perp} = 2.002636$, $\Delta H_{\parallel} = 0.014$ мТ, $\Delta H_{\perp} = 0.023$ мТ, для *E*-линий.

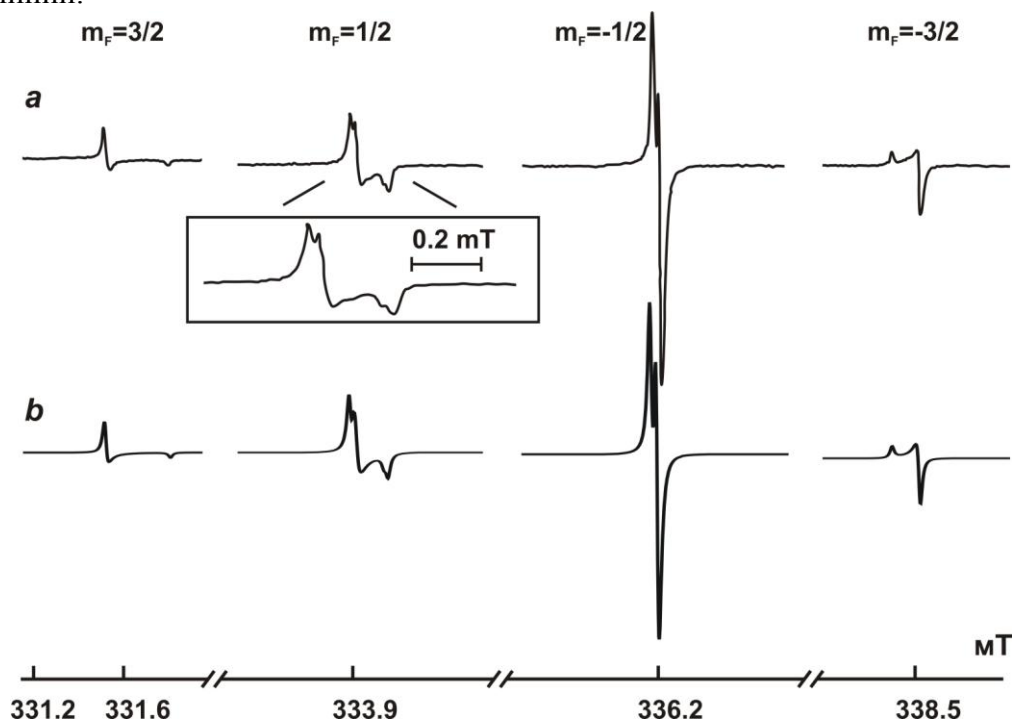


Рис. 1. Спектр ЭПР CH_3 в твердом CO_2 . Температура образца при записи спектра: 51,7 К. Резонансная частота – 9391,01 МГц. *a* - экспериментальный спектр, *b* – смоделированный спектр, полученный суперпозицией квартета линий симметрии *A* (вращательное состояние $J = 0$) и дублета линий симметрии *E* ($J = 1$).

Получение спектров высокого разрешения позволило зарегистрировать и измерить не только анизотропию тензора сверхтонкого взаимодействия, *A*, и *g*-тензора для обоих типов вращательного состояния молекулы (симметрии *A* и *E*), но и наблюдать анизотропию тензора ширины линии ΔH . Ранее такая анизотропия наблюдалась для CH_3 в твердом CO [1]. При этом тензор оказался изотропным для квартета линий симметрии *A* и аксиально-симметричным для дублета линий симметрии *E*. Это обстоятельство отражает тот факт, что взаимодействие радикала с матричным

окружением больше для молекулы в E -состоянии, чем для молекулы в A -состоянии [2]. Это, в свою очередь, отражается на различной степени торможения вращения радикала вокруг осей второго порядка, C_2 , лежащих в плоскости молекулы. В твердом CO_2 оба тензора ширины линии являются аксиально-симметричными. Следовательно, матрица CO_2 накладывает более жесткие ограничения на переориентацию вокруг C_2 -осей для радикала в состояниях обеих симметрий. В качестве примера изменения формы линий на рисунке 2 представлены для ряда значений температуры образца записи двух внешних компонент квартета симметрии A (верхние кривые) и их моделирование (нижние кривые) с учетом аксиальной симметрии тензоров A , g и ΔH .

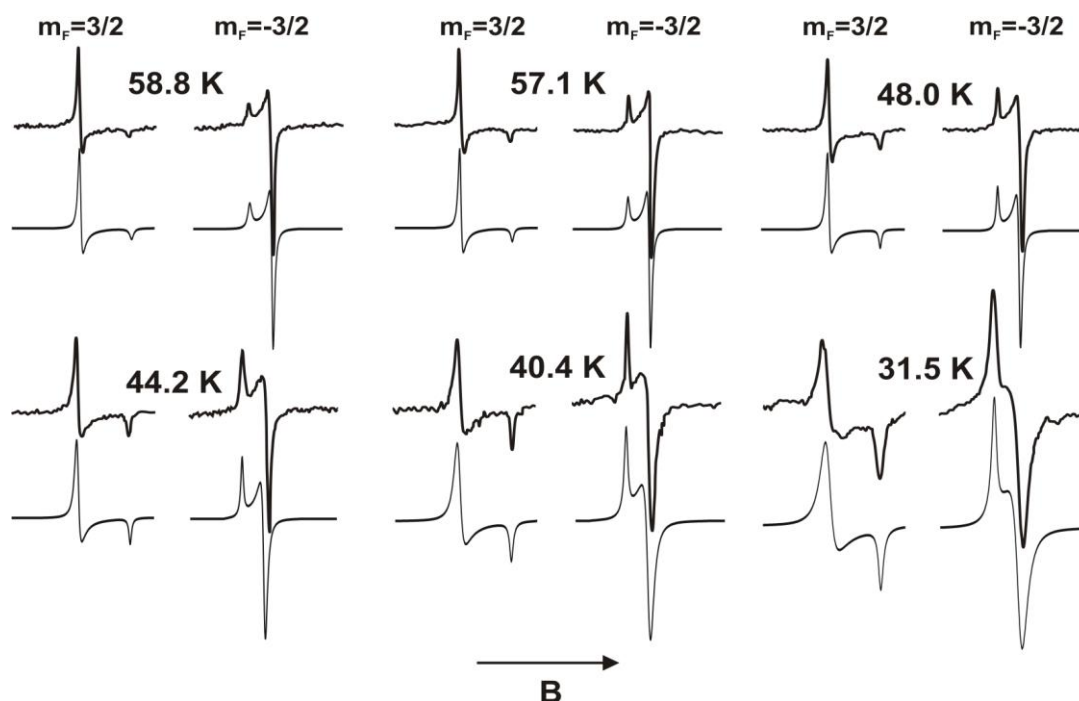


Рис. 2. Экспериментальный спектр (верхние кривые) и его моделирование (нижние кривые) радикала CH_3 в твердом CO_2 при различных температурах. Рисунок показывает изменение формы двух внешних линий квартета симметрии A . Хорошо видна как анизотропия ширины линии, так и зависимость этой анизотропии от температуры.

В докладе приводится оценка скорости переориентации молекулы CH_3 вокруг осей второго порядка и обсуждается температурно-ассистированный туннельный характер этого движения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-02-00373_a.

- [1] Yu.A. Dmitriev, V.D. Melnikov, K.G. Styrov, M.A. Tumanova, *Physica B* 449 (2014) 25.
 [2] N.P. Benetis, Yu.A. Dmitriev, *EPR of Free Radicals in Solids, Part I Trends in Methods and Applications*, in: A. Lund, M. Shiotani (Eds.), Springer Science + Business Media, Dordrecht, 2013, p.103.

Эффект Холла в $Mn_{1-x}Fe_xSi$ ($x < 0.12$)

И.И. Лобанова¹, В.В. Глушков^{1,2}, В.Ю. Иванов², С.В. Демишев^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (ГУ), 141700, Институтский пер., 9, г. Долгопрудный, Московская область, Россия

²Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН, 119991, ул. Вавилова, 38, Москва, Россия

email: lobanova@lt.gpi.ru

Нецентросимметричный спиральный магнетик с кубической структурой $B20$ $MnSi$ интересен своими нетривиальными физическими свойствами, включающими квантовый фазовый переход под давлением [1], образование скирмионной структуры в магнитной фазе вблизи $T_c \sim 30$ К [2] и топологический эффект Холла, возникающий в этой нетривиальной спиновой текстуре [3]. Замещение марганца железом подавляет переход в основное ферромагнитное состояние и приводит к возникновению двух квантовых критических точек, отвечающих исчезновению фазы с дальним магнитным порядком ($x \sim 0.12$) и подавлению фазы киральной спиновой жидкости с образованием квантовой критической фазы Гриффитса ($x_c \sim 0.24$) [4]. Несмотря на существующий «бум» в области исследований $MnSi$ и $Mn_{1-x}Fe_xSi$ [1-4], проблема разделения вкладов в эффект Холла в исследуемой группе материалов далека от своего решения. В большинстве работ акцент делается на исследовании аномального вклада в эффект Холла, для выделения которого используются различные, а иногда и взаимоисключающие процедуры обработки данных [5,6].

В результате исследования транспортных и магнитных свойств $Mn_{1-x}Fe_xSi$ ($x < 0.12$), выполненного на монокристаллических образцах в широком диапазоне температур (2–300 К) и магнитных полей (до 8 Тл), предложен новый подход к разделению нормального ($R_H B$) и аномального ($R_A M$) вкладов в эффект Холла, основанный на анализе температурных зависимостей $\rho_{xy}(T)$. В случае $MnSi$, представление данных $\rho_{xy}(B, M)$ в координатах $\rho_{xy}/B = f(\rho^2 M/B)$ (Рис. 1,а) и $\rho_{xy}/B = f(\rho M/B)$ (Рис. 1,б) показывает, что ниже точки Кюри ($T < T_c$) холловское сопротивление описывается зависимостью $\rho_{xy} = R_H B + 4\pi R_A M$ ($R_A = S_2 \rho^2$) с параметрами $R_H \approx -9.1 \cdot 10^{-5}$ см³/Кл и $S_2 \approx 0.091$ Ом⁻¹см⁻¹Гс⁻¹ (Рис. 1,а). В парамагнитной фазе ($T > T_c$) аномальный коэффициент Холла пропорционален удельному сопротивлению: $R_A = S_1 \rho$ ($R_H \approx -1.5 \cdot 10^{-4}$ см³/Кл, $S_1 \approx 3.1 \cdot 10^{-6}$ Гс⁻¹) (Рис. 1,б). Полученные параметрические зависимости $\rho_{xy}(B, M)$ с хорошей точностью описывают

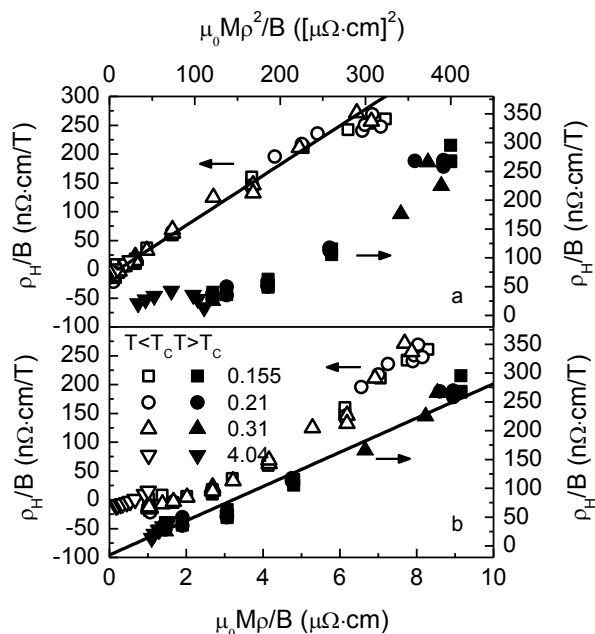


Рис.1 Холловское сопротивление ρ_{xy} а) в магнитной ($T < T_c$) и б) парамагнитной ($T > T_c$) фазах $MnSi$. Прямые показывают результат подгонки экспериментальных данных зависимостью $\rho_{xy}/B = R_H + 4\pi R_A M/B$ ($R_A = S_2 \rho^2$ (а) и $R_A = S_1 \rho$ (б)).

поведение кривых $\rho_{xy}(T, B < 5 \text{ Тл})$ в соответствующих температурных диапазонах [7]. Обнаруженная смена режимов аномального эффекта Холла с переходом от $R_A \sim \rho^2$ ($T < T_C$) к $R_A \sim \rho$ ($T > T_C$) свидетельствует о доминирующем вкладе процессов скошенного рассеяния (skew scattering) носителей заряда на магнитных ионах марганца в парамагнитной фазе MnSi. Отметим, что указанный режим ранее наблюдался при исследованиях эпитаксиальных пленок MnSi [8] и составов, легированных железом [9].

Анализ транспортных свойств $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ ($x < 0.12$) показал, что в парамагнитной фазе ($T > T_C(x)$) аномальный эффект Холла также описывается вкладом ассиметричного рассеяния (skew-scattering) носителей заряда. Установлено, что абсолютные значения параметров R_H и S_1 монотонно убывают с увеличением содержания железа до значений $R_H \approx -3.11 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{Кл}$, $S_1 \approx -2,1 \cdot 10^{-6} \text{ Гс}^{-1}$ для $x \sim 0.12$ (Рис.2). При этом уменьшение абсолютных значений коэффициента Холла, наблюдаемое в окрестности первой квантовой критической точки $x^* \sim 0.12$ (рис.2), указывает на компенсацию эффекта Холла вследствие равенства вкладов электронных и дырочных носителей заряда.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ 13-02-00160-а.

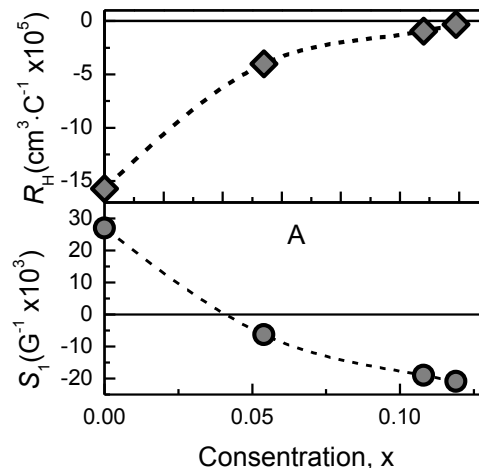


Рис. 2. Концентрационные зависимости параметров нормального и аномального вкладов в эффект Холла в парамагнитной фазе $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$.

- [1] D. Belitz et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 247205 (2005).
- [2] A. Tonomura et al., *Nano Lett.* **12**, 1673 (2012).
- [3] A. Neubauer et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 186602 (2009).
- [4] S.V. Demishev, et al., *JETP Letters* **98**, 933 (2013).
- [5] M. Lee et al., *Phys. Rev. B* **75**, 172403 (2007).
- [6] R. Ritz et al., *Phys. Rev. B* **87**, 134424 (2013).
- [7] V. Glushkov et al., *JETP Letters* **101** (2015).
- [8] Y. Li et al., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 117202 (2013).
- [9] B.J. Chapman et al., *Phys. Rev. B* **88**, 214406 (2013).

Магнитострикция и кривая равновесия фаз монокристалла LiHoF_4 И.В. Романова¹, В.И. Кротов², Б.З. Малкин¹, М.С. Тагиров¹¹Казанский федеральный университет, Институт физики, 420008, Кремлевская 18, Казань, Российская федерация²Казанский государственный энергетический университет, 420066, Красносельская 51, Казань, Российская федерацияe-mail: romanova.irina.vladimirovna@gmail.com

Кристалл LiHoF_4 рассматривается во многих работах как модельный изинговский дипольный ферромагнетик с осью легкого намагничивания, совпадающей по направлению с кристаллографической осью c [1].

В течение последних 15 лет в литературе обсуждается механизм разрушения дальнего магнитного порядка в монокристалле LiHoF_4 в магнитном поле H_t , перпендикулярном оси легкого намагничивания. При абсолютном нуле температуры переориентация намагниченности соответствует квантовому фазовому переходу. В работе [1] было показано, что в LiHoF_4 наблюдается как классический температурный фазовый переход в ферромагнитное состояние (поперечное магнитное поле $H_t=0$), так и квантовый фазовый переход ($H_t=H_c$, $T \rightarrow 0$). Измеренная кривая равновесия между ферромагнитной и парамагнитной фазами, определяющая зависимость критического магнитного поля от температуры, представлена в работе [1]. До настоящего времени вычисленные в различных работах фазовые диаграммы LiHoF_4 существенно отличаются от измеренной, причем результаты вычислений критически зависят от используемых параметров кристаллического поля [2, 3, 4].

Магнитные и магнитоупругие свойства кристаллов, содержащих редкоземельные (РЗ) ионы, определяются энергетическим спектром и структурой волновых функций основного мультиплета электронной $4f^n$ конфигурации РЗ ионов. Основным мультиплетом иона Ho^{3+} 5I_8 электронной оболочки $4f^{10}$ в кристалле LiHoF_4 расщепляется в кристаллическом поле с точечной группой симметрии S_4 на 13 уровней: 9 синглетов и 4 дублета. Основное состояние – некрамерсов дублет Γ_{34} , два вышележащих возбужденных состояния – синглеты Γ_2 . Полевые и температурные зависимости намагниченности монокристалла LiHoF_4 при различных ориентациях магнитного поля относительно кристаллографических осей решетки были измерены ранее в работе [5].

В настоящей работе из анализа спектральных данных и результатов моделирования изотермической намагниченности в зависимости от величины и направления внешнего магнитного поля с учетом электрон-деформационного взаимодействия определены параметры кристаллического поля в монокристалле LiHoF_4 и параметры электрон-деформационного взаимодействия. Расчеты намагниченности выполнены в рамках приближения самосогласованного поля с использованием численной диагонализации гамильтониана системы, оперирующего в полном пространстве состояний электронной оболочки $4f^{10}$, включающего энергию свободного иона гольмия, энергию иона в кристаллическом поле и электронную зеемановскую энергию [6].

Получено самосогласованное описание полевых зависимостей магнитострикции в различных направлениях приложенного магнитного поля и кривой фазового равновесия в монокристалле LiHoF_4 . На рисунках 1, 2 результаты расчетов сравниваются с данными измерений магнитострикции и кривой фазового равновесия.

В работе [7] были выполнены измерения расщепления основного дублета ионов гольмия в зависимости от температуры в ферромагнитном состоянии. Результаты

расчета расщепления дублета (эффективный спин $S=1/2$) в приближении молекулярного поля $\Delta(T) = g_{\parallel}\mu_B\lambda <S_z>$ и данные измерений можно согласовать, если ввести зависящую от температуры "постоянную" молекулярного поля $\lambda(T)$ при температурах ниже температуры Кюри $T_C=1.53$ К. Кривая 3 на рисунке 2 соответствует расчету с учетом изменения постоянной молекулярного поля с температурой.

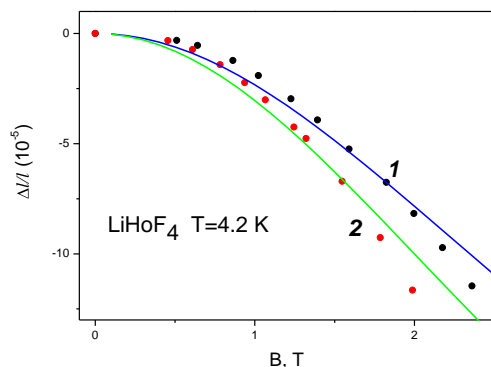


Рисунок 1. -Полевые зависимости при температуре 4.2 К продольной магнитоэлектрики во внешнем магнитном поле B (1 – $B \parallel [110]$, 2 – $B \parallel [210]$) монокристалла LiHoF_4 . Результаты расчетов представлены линиями, символы соответствуют экспериментальным данным.

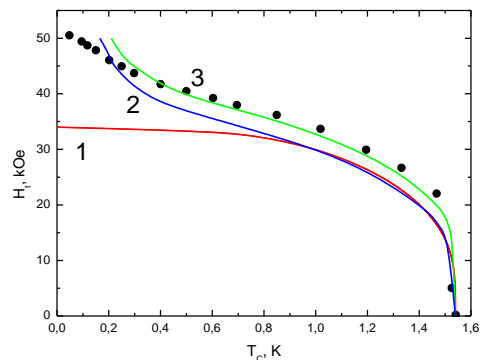


Рисунок 2. Кривая равновесия фаз монокристалла LiHoF_4 , сплошными линиями показаны результаты расчетов (1 – без учета сверхтонкого взаимодействия, 2 – с учетом сверхтонкого взаимодействия, 3 – с учетом поправки к постоянной молекулярного поля λ , экспериментальные данные показаны точками [1]).

В сравнении с расчетами, приведенными в [1], показана необходимость учета влияния поперечного магнитного поля на g_{\parallel} - фактор основного состояния и изменения постоянной молекулярного поля в зависимости от температуры, получено удовлетворительное описание экспериментальных данных в рамках предложенной самосогласованной модели.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, поддержана грантом РФФИ - № 15-02-06990.

[1] D. Bitko, T.F. Rosenbaum, G. Aeppli // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V.77. – N.5 – P.940.
 [2] P.B. Chakraborty, P. Henelius, H. Kjonsberg, A.W. Sandvik, S.M. Girvin // Phys. Rev. B. – 2004. – V.70. – P.144411.
 [3] H.M. Ronnow, J. Jensen, R. Parthasarathy, G. Aeppli, T.F. Rosenbaum, D.F. McMorrow, C. Kraemer // Phys. Rev. B. – 2007. – V.75. – P.054426.
 [4] S.M.A. Tabei, M.G.P. Gingras, Y.-J. Kao, T. Yavors'kii // Phys. Rev. B. – 2008. – V.78. P.184408.
 [5] I.V. Romanova, R.Yu. Abdulsabirov, S.L. Korableva, B.Z. Malkin, I.R. Mukhamedshin, H. Suzuki, M.S. Tagirov // Magn. Resonance in Solids. EJ. – 2006. – V. 8. – P. 1-5.
 [6] И.В. Романова, Б.З. Малкин, М.С. Тагиров // Оптика и спектроскопия. – 2014. – Т.116. – N.6. – С.92-100.
 [7] J.E. Battison, A. Kastent, M.J.M. Leask, J.B. Lowry, B.M. Wanklyn // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1975. - V. 8. – P. 4089-4095.

Эффект интерференции состояний в ЭПР-спектроскопии ван-флековских парамагнетиков

В.Ф. Тарасов, А.А. Коновалов

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук. 420029, Сибирский тракт 10/7, Казань, Россия

e-mail: tarasov@kfti.knc.ru

В оптической спектроскопии эффект интерференции атомных состояний при пересечении атомных энергетических уровней известен давно [1] и широко используется для спектроскопии сверхвысокого разрешения [2]. Как частный случай, явление изменения поляризации рассеянного атомами света при вырождении зеемановских подуровней в нулевом магнитном поле известно как эффект Ханле [3, 4].

Нами впервые экспериментально обнаружен и исследован эффект интерференции состояний в ЭПР-спектроскопии ван-флековских парамагнетиков при снятии вырождения сверхтонких подуровней примесного иона тулия в синтетическом форстерите.

Для примесного иона Tm^{3+} в форстерите два нижних электронных уровня являются синглетами с начальным расщеплением (в единицах частоты) около 245 ГГц. Поэтому зависимость резонансной частоты от магнитного поля носит нелинейный характер, и при обычной методике записи спектров ЭПР с модуляцией магнитного поля амплитуда сигнала уменьшается в малых магнитных полях из-за ослабления зависимости энергий электронных уровней от магнитного поля ($dv/dB \rightarrow 0$ при $B_0 \rightarrow 0$). Тем не менее, на спектрах ЭПР, записанных на частотах, соответствующих начальному расщеплению неоднородно уширенного резонансного перехода иона тулия в форстерите, в малых магнитных полях были обнаружены узкие линии. Измерения были проведены при 4.2 К методом стационарной ЭПР-спектроскопии в диапазоне частот 250 – 300 ГГц на перестраиваемом по частоте спектрометре ЭПР [5].

На рис. 1а приведены спектры иона тулия в форстерите, записанные для парамагнитного центра Tm^{3+} с начальным расщеплением 276.4 ГГц на разных частотах в обычном режиме с модуляцией магнитного поля. Как и ожидалось, при приближении частоты записи спектра к величине, соответствующей расщеплению в кристаллическом поле, величина резонансного магнитного поля уменьшается, а ширина линии на спектрах увеличивается. Тулий имеет один стабильный изотоп ^{169}Tm с ядерным спином $I = 1/2$. Поэтому спектр ЭПР состоит из 2 разрешённых переходов между ядерными подуровнями с одинаковыми проекциями ядерного момента на ось квантования ($\Delta I_z = 0$). На спектрах, записанных на частотах 276 и 274 ГГц, в дополнение к основному резонансному поглощению видны узкие линии, появляющиеся вблизи нулевого значения магнитного поля. На рис. 1б представлены экспериментальные спектры, более детально характеризующие появление узких линий. Видно, что в диапазоне частот 274 – 280 ГГц, соответствующем ширине линии резонансного перехода в нулевом магнитном поле, в области малых магнитных полей наблюдаются две узкие линии, имеющие различную фазу. Точно в нулевом магнитном поле наблюдается линия, фаза которой совпадает с фазой основного сигнала. Вторая линия, наблюдающаяся в магнитном поле около 120 Гс, имеет обратную фазу, соответствующую уменьшению величины резонансного поглощения микроволновой энергии примесными ионами тулия в форстерите.

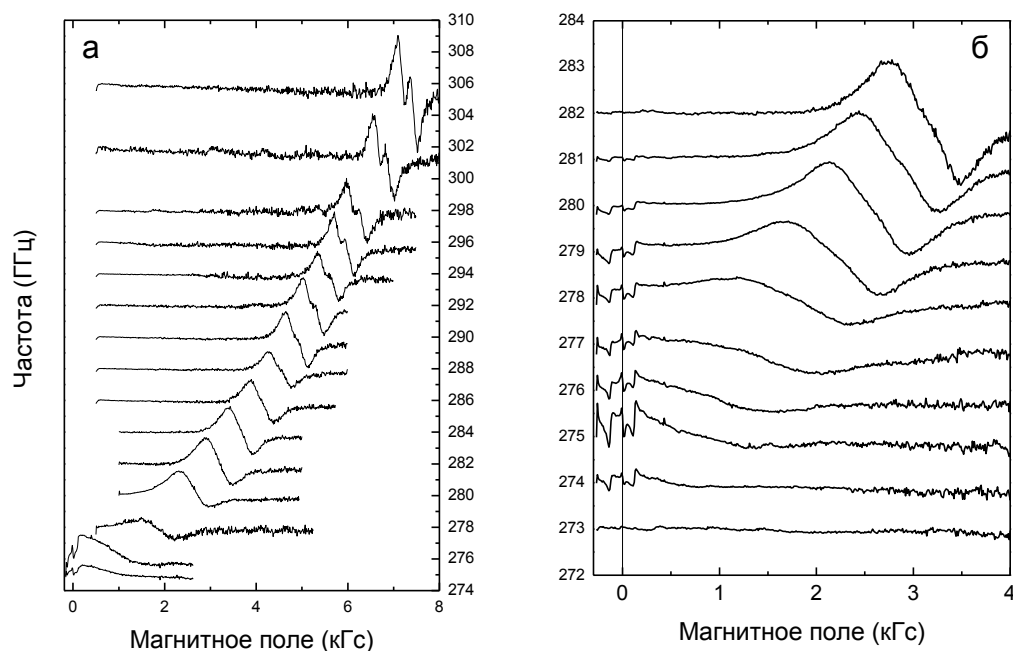


Рис. 1. Спектры ЭПР примесного центра Tm^{3+} в форстерите с начальным расщеплением 276,4 ГГц. Положение нулевой линии спектров по оси ординат соответствует частоте записи спектра.

Вблизи нулевого значения магнитного поля модуляция магнитного поля не вызывает заметного сдвига частоты основного резонансного поглощения ионов тулия, и положение узких линий на спектрах не зависит от частоты записи спектра. Поэтому мы полагаем, что резкое изменение величины резонансного поглощения связано с проявлением особенностей спиновой динамики.

Появление линии в нулевом магнитном поле мы связываем с интерференцией двух электронно-ядерных состояний при вырождении сверхтонких подуровней в нулевом магнитном поле. Узкая линия в магнитном поле около 120 Гс появляется благодаря выключению механизма спектральной диффузии для одной из сверхтонких компонент спектра в поле, где производная зависимости энергии от магнитного поля принимает нулевое значение [6].

Численная симуляция спектра ЭПР вблизи нулевого значения магнитного поля позволила оценить время декогеренции для иона Tm^{3+} в форстерите $T_2 \sim 6 \cdot 10^{-8}$ с.

- [1] Показаньев В.Г., Скроцкий Г.В. УФН **102**, 623-656 (1972).
- [2] Александров Е.Б., Калитевский Н.И., Чайка М.П. УФН **129**, 155-165 (1979).
- [3] Hanle W. Zs.Phys. **30**, 93 (1924).
- [4] Новиков Л.Н., Скроцкий Г.В., Соломахо Г.И. УФН **113**, 597-625 (1974).
- [5] Tarasov V.F., Shakurov G.S. Appl. Magn. Reson. **2**, n.3, 571 (1991).
- [6] Salikhov K.M., Tarasov V.F. Magn. Res. Chem. **43**, S221 (2005).